

THÈSE

présentée

A L'UNIVERSITÉ CLAUDE-BERNARD - LYON

pour obtenir

LE GRADE DE DOCTEUR ÈS SCIENCES PHYSIQUES

par

HUYNH VAN CONG

Licencié ès Sciences

ÉTUDE DES PROPRIÉTÉS ÉLECTRONIQUES DES SEMI-CONDUCTEURS TRÈS DOPÉS PAR UNE MÉTHODE DE FONCTIONS DE GREEN

Soutenue le 28 Septembre 1972, devant la Commission d'Examen

MM. G. MESNARD Président

L. NÉEL
J. LAFOUCRIÈRE .. } Examineurs
F. BROUERS }

LYON

Imprimerie BOSC Frères
42, quai Gailleton, 42

1972



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41552607_0032

THÈSE

présentée

A L'UNIVERSITÉ CLAUDE-BERNARD - LYON

pour obtenir

LE GRADE DE DOCTEUR ÈS SCIENCES PHYSIQUES

par

HUYNH VAN CONG

Licencié ès Sciences

ÉTUDE DES PROPRIÉTÉS ÉLECTRONIQUES DES SEMI-CONDUCTEURS TRÈS DOPÉS PAR UNE MÉTHODE DE FONCTIONS DE GREEN

Soutenue le 28 Septembre 1972, devant la Commission d'Examen

MM. G. MESNARD Président

L. NÉEL	} Examineurs
J. LAFOUCRIÈRE ..	
F. BROUERS	

LYON

Imprimerie BOSC Frères
42, quai Gailleton, 42

—
1972

UNIVERSITE CLAUDE BERNARD

LYON

Président : Monsieur le Professeur J. BOIDIN

1er Vice Président : M. R. TOURAINE, Maître de Conférences agrégé

2ème Vice-Président : M. P. PONCET, Maître-Assistant

3ème Vice-Président : M. D. SETTELEN, Etudiant

UNITES D'ENSEIGNEMENT ET DE RECHERCHE

UNITES

DIRECTEURS

U.E.R. médicale Grange-Blanche

M. le Professeur D. GERMAIN

U.E.R. médicale Alexis Carrel

M. le Professeur C. GIROD

U.E.R. médicale LYON-Nord

M. le Professeur A. BERTOYE

U.E.R. médicale LYON-Sud-Ouest

M. le Professeur L. TOLOT

U.E.R. des Sciences Pharmaceutiques

M. M. CARRAZ, Maître de Conférences agrégé

U.E.R. des Techniques de Réadaptation

M. le Professeur P. MOUNIER KUHN

U.E.R. de Biologie Humaine

M. J. C. CZYBA, Maître de conférences agrégé

U.E.R. d'Education Physique et Sportive

M. A. MILLON, Professeur E. P. S.

U.E.R. Des Sciences Odontologiques

M. R. VINCENT

U.E.R. de Mathématiques

M. le Doyen J. BRACONNIER

U.E.R. de Physique

M. le Professeur M. DUFAY

U.E.R. de Chimie et Biochimie

M. le Professeur D. GAUTHERON

U.E.R. des Sciences de la Nature

M. le Professeur L. DAVID

U.E.R. de Biodynamique et Psychopédagogie

M. R. FONTANGES, Maître de Conférences

U.E.R. de Physique Nucléaire

M. le Professeur A. SARAZIN

U.E.R. de Mécanique

M. le Professeur J. MATHIEU

Observatoire

M. le Professeur J. H. BIGAY

Institut Universitaire de Technologie I

M. le Professeur B. POUYET

Institut Universitaire de Technologie II

M. J. GALLET

Secrétaire Général : M. P. IZAUTE

kính dâng lên Ba,
kính tặng Mẹ,
tặng các Em và Line .

REMERCIEMENTS

Ma profonde gratitude va d'abord à Monsieur le Professeur L. NÉEL, Membre de l'Institut, Directeur du Laboratoire de Magnétisme de Grenoble, qui a bien voulu s'intéresser à mon travail et accepter de faire partie de mon Jury de Thèse. Je le prie de bien vouloir agréer l'expression de mes respectueux remerciements.

Je tiens à remercier Monsieur le Professeur G. DÉJARDIN, Membre de l'Institut, qui a bien voulu s'intéresser à mon travail et transmettre certains résultats essentiels à l'Académie des Sciences.

Ma vive gratitude va ensuite à Monsieur le Professeur G. MESNARD, Directeur du Laboratoire de Physique Electronique et de Physique du Solide de Lyon, qui a bien voulu m'accueillir dans son Laboratoire et m'a confié ce sujet de Thèse, tout en acceptant de diriger mes recherches. Je tiens à lui exprimer mon immense reconnaissance pour ses encouragements constants, sa patiente bienveillance et ses inestimables conseils dont il m'a fait bénéficier.

Mes vifs remerciements vont aussi à Messieurs les Professeurs J. LAFOUCRIÈRE, de l'Institut de Physique Nucléaire de Lyon, et F. BROUERS, de la Faculté des Sciences de Liège, qui ont bien voulu accepter de faire partie de mon Jury de Thèse.

Enfin, je remercie Monsieur BRIDE ainsi que tous ceux qui ont participé activement à la réalisation matérielle de ce travail.

I . INTRODUCTION

L'influence des impuretés sur les états électroniques des semi-conducteurs a déjà fait l'objet d'un grand nombre de publications , tant du point de vue expérimental [1 à 15] que théorique [16 à 34] . Ces travaux concernent les propriétés thermodynamiques , les phénomènes de transport des électrons et les propriétés optiques dans les semi-conducteurs dopés . En général , l'étude a été faite dans l'approximation des électrons indépendants ou dans l'approximation des liaisons fortes .

On peut classer les états électroniques du matériau pur suivant leurs vecteurs d'onde $\vec{k}$, compte tenu de la périodicité du réseau cristallin ; les fonctions d'ondes de Bloch sont dérivées d'ondes planes . Le spectre d'énergie comprend des bandes d'énergie permises , séparées par des bandes d'énergie interdites . Pour les électrons des couches interne^s ou pour des bandes d'énergies très négatives , les électrons sont presque liés ; les bandes sont étroites et largement espacées . Elles s'élargissent rapidement avec les recouvrements des orbitales atomiques entre sites voisins . Pour les électrons des couches externes ou pour des bandes d'énergies normalement vides , les électrons sont presque libres , car ils sont peu influencés par le potentiel du réseau cristallin .

A une température suffisamment basse , les impuretés et imperfections introduisent des états électroniques particuliers et en même temps ces sites servent de centres de diffusion et de piégeage des porteurs . Il est bien connu qu'une impureté isolée dans un semi-conducteur crée des états d'énergie dans la bande interdite . La fonction d'onde correspondante est localisée autour de cette impureté . Mais à partir d'une certaine concentration en impuretés , les fonctions d'onde se recouvrent d'une manière appréciable et les niveaux d'impuretés s'élargissent pour former une bande dite "bande d'impuretés" . Nous allons préciser ce cas .

On peut distinguer , dans les semi-conducteurs relativement dopés trois cas correspondant aux concentrations en impuretés faible , inter-

médiaire et forte .

A - Faible concentration en impuretés .

Quand la concentration en impuretés est faible (par exemple $\rho < 10^{16}$ at/cm³ dans le germanium) , les électrons sont localisés à chaque site d'impureté . Les aspects suivants sont obtenus .

A.1 - Sauts électroniques dans la bande d'impuretés . Des fluctuations du potentiel total par rapport à sa moyenne sont produites par les impuretés chargées et il existe des corrélations entre électrons [10, 23, 35] . Ceux-ci peuvent alors sauter d'un site à un autre avec l'assistance des phonons [36 à 38] , d'où une conduction électronique dans la bande d'impuretés se manifestant à basse température lorsque les donneurs sont partiellement compensés . Ce type de conduction a déjà fait l'objet d'un grand nombre de publications [16, 38 à 60] . On considère que les états électroniques de la bande d'impuretés sont localisés au-dessous de la bande de conduction et la conductivité électronique tend vers zéro avec la température d'après le critère d'Anderson [57] (absence de diffusion) . Les théories de la conduction électronique dans les bandes d'impuretés dûes à Miller et Abrahams [60] , Mott et Twose [38] , Pollak [56] sont basées sur ces hypothèses .

A.2 - Libre parcours moyen de l'électron . D'une façon générale , des états localisés apparaissent dans un "pseudo-bande interdite" (c'est-à-dire une zone de minimum suffisamment profond de la densité d'états) , le libre parcours moyen de l'électron étant de l'ordre de sa longueur d'onde [39, 43, 61] et , d'après Ioffe et Regel [43] , ne pouvant être inférieure à l'inverse du nombre d'onde de l'électron .

A.3 - Largeur de la bande d'impuretés . La distance moyenne entre une impureté et ses premiers voisins est $r_s = (4\pi\rho/3)^{-1/3}$. L'énergie d'un électron résonnant entre une impureté et ses premiers voisins couvre une gamme [62] d'étendue $J \sim \exp(-\alpha r_s)$ où α est l'inverse du rayon de la première

orbite de Bohr . La bande d'énergie est d'autant plus large que r_s est plus faible c'est-à-dire la densité d'impuretés plus élevée . Récemment, Lukes et ses collaborateurs [18] ont conclu d'une façon analogue en utilisant la méthode des cumulants et les potentiels à courte distance . On peut donc relier la largeur de la bande à l'ordre à courte distance , au moins dans le cas d'une bande s non dégénérée .

A. 4 - Distance minimale d'approche entre deux atomes d'impuretés . Dans le même ordre d'idées , la notion de distance minimale d'approche entre deux impuretés a été introduite par Beeby et Edwards [63] , et récemment par Cyrot-Lackman [64] . En utilisant un théorème dû à Perron [64] sur la localisation des valeurs propres d'une matrice , Cyrot-Lackman montre que la bande est d'autant plus large que la distance minimale d'approche est plus faible . Pour une concentration en impuretés assez élevée , cette notion ne s'impose pas .

A. 5 - Effet d' interférence des impuretés . Cet effet est important dans l'évaluation précise de la moyenne de la fonction de Green ou de la densité d'états prise sur une distribution aléatoire d'impuretés [35,65] .

B - Concentration intermédiaire en impuretés .

Quand on envisage l'occupation simultanée d'un certain site par deux électrons , on note qu'il doit y avoir une différence entre l'énergie d'ionisation et l'affinité électronique . Cet aspect intervient particulièrement à une température et pour une concentration en impuretés intermédiaires . Fritzsche [10] a observé ce phénomène à partir de mesures de résistivité . Ce dernier s'atténue quand la concentration en impuretés croît et disparaît au-delà d'une certaine concentration dite critique . Il se produit une transition isolant-métal ou "transition de Mott" [16, 35, 38, 63] . Expérimentalement on trouve [10] que cette concentration critique en impuretés est à peu près égale à 5×10^{16} at/cm³ dans le germanium .

C - Concentration élevée en impuretés .

Quand la concentration en impuretés est élevée (par exemple , $\rho > 5 \times 10^{16} \text{ at/cm}^3$ dans le germanium) les fonctions d'onde électronique se recouvrent d'une façon importante et les électrons sont relativement libres . Si le recouvrement entre les orbitales atomiques du niveau fondamental n'est pas trop important , la bande ainsi formée ne chevauche pas avec celle qui est formée à partir du premier niveau excité et avec la bande de conduction . Mais , au-delà d'une certaine concentration , il y a chevauchement et la bande d'impuretés apparaît comme un prolongement de la bande de conduction dans un semi-conducteur de type n . La concentration limite entre les deux cas est grossièrement déterminée à partir du modèle hydrogénoïde [23,64,66] : elle est de l'ordre de $5 \times 10^{18} \text{ at/cm}^3$ pour le germanium .

La plupart des effets cités dans le cas A n'apparaissent plus pour une concentration élevée en impuretés .

C.1 - La compensation n'est pas nécessaire dans ce cas . Les fluctuations du potentiel total causées par les impuretés minoritaires chargées , les effets de corrélation entre électrons et l'interaction électron-phonon peuvent être négligés (approximation de Hartree) . La conduction par les électrons de la bande d'impuretés est donc du type métallique .

C.2 - Pour une concentration élevée en impuretés , le libre parcours moyen de l'électron est grand par rapport à sa longueur d'onde [67,68] . Le vecteur d'onde $\vec{k}$ est un bon nombre quantique .

C.3 - Supposons toutes les impuretés identiques et réparties d'une manière moyenne/aléatoire . La distance entre deux impuretés a alors un caractère gaussien . Elle est nettement plus grande que la maille du réseau cristallin et on peut donc négliger la structure discrète du réseau en introduisant seulement une masse effective pour les électrons . Les arguments cités en A.3 s'appliquent encore : la bande devient très large quand la distance moyenne entre impuretés est très faible , c'est-à-dire la concentration en impuretés très élevée , mais cette distance doit rester nettement plus grande que la maille

du réseau cristallin , d'où une limite supérieure de la concentration en impuretés .

Dans cette gamme de concentrations , le potentiel total est une superposition des potentiels individuels . Ceci signifie que le potentiel total varie moins que le potentiel dû à une seule impureté . Un potentiel atomique avec effet d'écran est relativement satisfaisant pour une telle situation , le potentiel total ayant un caractère gaussien .

C.4 - Les orbitales atomiques se recouvrent notablement ; la notion de la distance minimale d'approche n'intervient pas .

C.5 - On peut négliger l'effet d'interférence des impuretés (c'est la cinquième approximation de Klauder [69]) . Dans cette approximation , on ne tient compte que de la diffusion par une impureté , les effets des autres impuretés étant moyennés d'une façon auto-cohérente lors de la diffusion par une impureté .

C.6 - Finalement on néglige le couplage spin-orbite dont l'influence est faible sur la densité d'états [70] .

Après avoir classé les types de conduction électronique selon la concentration en impuretés , nous allons rappeler succinctement certaines méthodes et approximations déjà utilisées pour étudier les systèmes désordonnés .

En général , on a traité le problème à une dimension [71] . Les solutions exactes peuvent être obtenues en principe et on peut comparer les résultats trouvés à partir de différentes approximations . Mais ces solutions à une dimension ne se généralisent pas facilement à trois dimensions .

A trois dimensions , le problème n'a jamais reçu de solutions exactes de caractère général . Il a fait l'objet d'un grand nombre de publications importantes [72 à 75] .

Aigrain [72] a utilisé un développement de la fonction d'onde à partir des orbitales atomiques centrées sur les sites/ des impuretés en supposant

que tous les coefficients du développement sont égaux en module . Il a obtenu une bande de largeur finie des états non-localisés .

Lifschitz [73] a étudié la forme de la bande d'impuretés , en fonction de la concentration en impuretés , créée par des potentiels localisés aux sites du réseau cristallin . Il s'est toutefois limité aux faibles concentrations et a montré que la densité d'états décroît exponentiellement vers la limite inférieure de l'énergie .

Halperin et Lax [74] ont étudié la forme de la queue de la bande par une méthode variationnelle . La queue de la bande s'étend à l'infini avec une loi de densité d'états exponentielle en $\exp(-|E|^\beta)$ pour $1/2 \leq \beta \leq 2$, quand l'énergie E croît en valeur absolue .

Bonch Bruevich [75] a traité ensemble la matrice cristalline et les impuretés en supposant que le potentiel total dû à l'ensemble des impuretés est lentement variable et l'approximation de Thomas-Fermi est utilisée . La bande de conduction et la bande d'impuretés forment une nouvelle bande avec une queue importante aux énergies négatives .

Parmi les diverses méthodes , la plus puissante et la plus élégante est celle des fonctions de Green . Edwards [76] le premier a introduit le concept de "propagateur" (ou opérateur de Green) dans les structures désordonnées . Klauder [69] a amélioré et généralisé la méthode d'Edwards en comparant ses résultats dans le cas à une dimension avec les solutions exactes . Il ont utilisé tous les deux la technique habituelle de diagrammes représentés dans l'espace des impulsions .

Une méthode différente a été proposée par Matsubara et Toyozawa [23] . Il s'agit d'une méthode perturbative des fonctions de Green avec des diagrammes représentés dans l'espace des positions . Ils ont utilisé un modèle très simplifié des systèmes complètement désordonnés où le potentiel atomique est coulombien , la présence de la bande de conduction est complètement négligée et l'approximation de liaisons fortes est utilisée .

Yonezawa [65, 77] a comparé ces méthodes de fonctions de Green et a pu montrer qu'il existe une correspondance biunivoque entre les dia-

grammes de Edwards et Klauder d'une part et entre les diagrammes de Edwards et Matsubara-Toyozawa d'autre part . Elle a pu aussi représenter de façon schématique les moments et les cumulants par des diagrammes dans la représentation de Edwards et étudier systématiquement les approximations d'ordre élevé en tenant compte des interférences d'impuretés .

En présence d'un faible champ magnétique , Matsubara et Kaneyoshi [24] ont utilisé la méthode de Matsubara et Toyozawa [23] précédemment citée pour l'étude de l'effet du faible champ magnétique sur la conduction des électrons dans la bande d'impuretés à partir du formalisme de Kubo [22] Une expression du coefficient de Hall a été obtenue en termes de fonctions de Green . Ils ont pu conclure que le coefficient de Hall est toujours négatif .

Utilisant la méthode de Yonezawa-Klauder [65, 77, 69] avec une modification pour tenir compte de l'interaction entre la bande de conduction et la bande d'impuretés imposée par les potentiels d'impuretés à courte distance , Saitoh et ses collaborateurs [19, 27] ont pu étudier qualitativement les propriétés thermodynamiques et de transport électronique ordinaire de la bande d'impuretés des semi-conducteurs dopés .

Edwards [76, 67] a proposé dans l'étude des états électroniques une condition dite "condition géométrique" qui consiste à décomposer une fonction de corrélation d'ordre élevé en une somme des produits de fonctions de corrélation d'ordre deux en négligeant les fonctions de corrélation d'ordre impair .

Lukes et ses collaborateurs [78, 79] ont adopté cette approximation géométrique pour construire analytiquement les moments et les cumulants dans la représentation de Edwards . Leurs résultats sont d'ailleurs les mêmes que ceux trouvés par Yonezawa [77] .

Edwards et Gulyaev [17] ont les premiers introduit une approche par l'intermédiaire de l'intégrale de parcours de Feynman pour calculer la moyenne prise sur l'ensemble des impuretés de la fonction de Green et de la densité d'états électronique , spécialement utilisée dans le cadre de l'approximation gaussienne pour une concentration élevée en impuretés .

Utilisant cette méthode , Jones et Lukes [79] ont pu exprimer la densité d'états électronique en termes des cumulants définis sur la mesure de Feynman , calculer exactement la densité d'états électronique à une dimension en la comparant avec les résultats de Frisch et Lloyd [71] et déterminer la densité d'états à trois dimensions avec un potentiel coulombien tenant compte de l'effet d'écran en comparaison avec les résultats approchés de Kane [80] .

Une année après ,Lukes et ses collaborateurs [18] ont étudié systématiquement la densité d'états électronique à trois dimensions avec l'effet d'écran purement dû aux électrons en présence d'un champ magnétique , utilisant la méthode de fonctions de Green et un modèle simplifié des semi-conducteurs très dopés où l'influence du réseau cristallin périodique est contenue dans la masse effective isotrope de l'électron m^x , la constante diélectrique est statique , le potentiel total des impuretés a un caractère gaussien , et finalement tous les effets de corrélation entre électrons et d'interaction entre électron-phonon sont négligés .

Dans ces conditions , Van Cong et Mesnard [20, 21, 28 à 34] ont développé l'emploi de cette approximation , utilisé la densité d'états électronique des semi-conducteurs très dopés trouvée par Lukes et ses collaborateurs [18] , et étudié systématiquement les propriétés thermodynamiques , les effets galvanomagnétiques , thermoélectriques , thermomagnétiques et adiabatiques , les propriétés optiques dans un faible champ magnétique à une basse température .

A partir de cette théorie avec l'effet d'écran purement dû aux électrons nous construirons un modèle de semi-conducteur très dopé et partiellement compensé de type n où l'effet d'écran^{est/} dû non seulement aux électrons mais encore aux ions . Tous les résultats de Van Cong et Mesnard [20, 21, 28 à 34] seront alors modifiés dans ce modèle .

II . DENSITE D'ETATS DANS UN FAIBLE CHAMP MAGNETIQUE

A - Description générale du modèle .

Considérons un système dans l'approximation à un électron où l'interaction d'un électron avec l'ensemble d'impuretés est donnée par

$$\mathcal{H}_1 = \sum_{i=1}^N v (\vec{r} - \vec{R}_i), \quad (\text{II. 1})$$

N étant un très grand nombre d'impuretés et $v (\vec{r} - \vec{R}_i)$ l'énergie potentielle due à une impureté ionisée présente au site $\vec{R}_i$ du réseau cristallin .

La probabilité de trouver les impuretés aux positions $\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_N$ est

$$P(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_N) d\vec{R}_1 \dots d\vec{R}_N = \frac{1}{V} d\vec{R}_1 \dots d\vec{R}_N, \quad (\text{II. 2})$$

où V est le volume total du système .

Le modèle utilisé pour l'étude de différentes propriétés physiques repose sur l'emploi de l'hamiltonien

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1, \quad (\text{II. 3})$$

où $\mathcal{H}_0$ est l'énergie cinétique d'un électron de charge $-e$ dans un champ magnétique uniforme $\vec{H}$. Nous prenons

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2m^*} \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2, \quad (\text{II. 4})$$

en introduisant une masse effective m pour l'électron dans un réseau idéal périodique , $\vec{p}$ étant le vecteur quantité de mouvement , c la vitesse de la

lumière, $\vec{A}$ le potentiel vecteur.

Définissant l'opérateur de Green $G^\pm$ par

$$G^\pm = \frac{1}{E - \mathcal{H} \pm i\delta} \quad \text{avec} \quad \delta \rightarrow +0, \quad (\text{II. 5})$$

la densité d'états moyenne est

$$N(E) = -\frac{1}{2\pi} \text{tr} \langle \text{Im} G(E) \rangle, \quad (\text{II. 6})$$

où $\langle \dots \rangle$ représente une moyenne prise sur l'ensemble des positions $\vec{R}_i$ dite moyenne configurationnelle avec la distribution de probabilité (II. 2).

Une approche de l'étude des semi-conducteurs très dopés par l'intégrale de parcours, sans utilisation de méthodes perturbationnelles ou semi-perturbationnelles, a été suggérée par Edwards et Gulyaev [17].

Un opérateur de Feynman [79, 81] est défini par

$$i \langle G(\vec{r}, \vec{r}', E) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(i \frac{E t}{\hbar}\right) \langle K(\vec{r}, \vec{r}', t) \rangle dt, \quad (\text{II. 7})$$

où

$$K(\vec{r}, \vec{r}', t) = \mathcal{N} \int_{\vec{r}(0)}^{\vec{r}(t)} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}_0 d\tau - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}_1(\vec{r}(\tau)) d\tau \right\} \delta \vec{r}(t) \quad (\text{II. 8})$$

est une intégrale de parcours et $\mathcal{N}$ un facteur de normalisation.

En prenant la moyenne configurationnelle de l'expression (II. 8), on obtient

$$\begin{aligned} & \langle K(\vec{r}, \vec{r}', t) \rangle \\ = & \mathcal{N} \int_1 \dots \int_{t_0}^{\vec{r}(t)} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}_0 d\tau - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}_1(\vec{r}(\tau)) d\tau \right\} \delta \vec{r}(t) \prod_{i=1}^N \frac{d\vec{R}_i}{V}. \end{aligned} \quad (\text{II. 9})$$

D'autre part, pour un volume infini, la concentration en impuretés ρ reste finie. Nous remarquons que d'après la théorie des cumulants [79, 82, 83], la moyenne cumulante, prise avec les positions $\vec{R}_1$ des impuretés distribuées sur l'ensemble des sites du réseau cristallin, d'une fonction exponentielle, est égale à l'exponentielle d'une moyenne cumulante de cette exponentielle moins 1 (théorème de Kubo, 1962). La moyenne cumulante de l'expression (II. 8) s'écrit donc

$$\langle K(\vec{r}, \vec{r}', t) \rangle = \int_{\vec{r}(0)}^{\vec{r}(t)} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}_0 d\tau - \frac{1}{V} \int d^3\vec{R} \left[\exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_0^t v(\vec{r}(\tau) - \vec{R}) d\tau \right) - 1 \right] \right\} \delta(\vec{r}) . \quad (\text{II. 10})$$

En utilisant l'approximation gaussienne, on obtient

$$\begin{aligned} \langle K(\vec{r}, \vec{r}', t) \rangle &= \int_{\vec{r}(0)}^{\vec{r}(t)} \exp \left\{ \left(\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}_0 d\tau \right) - \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^t \int_0^t \langle \langle \mathcal{H}_1(\vec{r}[\tau_1]) \mathcal{H}_1(\vec{r}[\tau_2]) \rangle \rangle_c d\tau_1 d\tau_2 \right\} \delta(\vec{r}(t)) . \\ & \quad (\text{II. 11}) \end{aligned}$$

Nous ne conserverons pas comme zéro de l'énergie l'état le plus bas de la bande de conduction du solide idéal; nous le décalons de la valeur du cumulant du premier ordre c'est-à-dire de la moyenne de l'énergie potentielle des impuretés $V_0 = \rho \int v(\vec{r}) d^3\vec{r}$ et nous prenons pour le cumulant du second ordre

$$\langle \langle \mathcal{H}_1 \mathcal{H}_1 \rangle \rangle_c = \sigma^2(\vec{r}[\tau_1] - \vec{r}[\tau_2]) \sim \sigma^2(0) = \sigma^2 = \rho \int v^2(\vec{r}) d^3\vec{r} .$$

En adoptant une énergie potentielle attractive coulombienne avec l'effet d'écran, on a : $v(\vec{r}) = -(e^2/\epsilon \vec{r}) \exp(-\vec{r}/L)$, (II. 12)

où ϵ est la constante diélectrique statique et L est la longueur d'écran.

Le zéro des énergies et le cumulant du second ordre sont caractérisés respectivement par

$$V_0 = 4\pi \rho \int_0^\infty v(r) r^2 dr = 4\pi \rho e^2 \epsilon^{-1} L^2 \quad (\text{II. 13})$$

et
$$\sigma^2 = 2 \pi \varrho L e^4 \varepsilon^{-2} \quad (\text{II. 14})$$

L'équation (II. 11) donne donc

$$\langle K(\vec{r}, \vec{r}', t) \rangle = K_0(\vec{r}, \vec{r}', t) \exp\left(-\frac{\sigma^2 t^2}{2 \hbar^2}\right). \quad (\text{II. 15})$$

où $K_0(\vec{r}, \vec{r}', t)$ est un propagateur d'électron libre dans un champ magnétique $\vec{H} = (0, 0, H)$ dirigé suivant l'axe des z . On a :

$$\mathcal{H}_0 = \frac{m^*}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) + \frac{eH}{2c} (x \dot{y} - y \dot{x}) + \frac{e^2 H^2}{8 m^* c^2} (x^2 + y^2),$$

où le second terme du membre de droite est proportionnel à la composante du moment cinétique orbital L_z si $\vec{r}$ est mesuré à partir du noyau et le troisième terme correspond à une correction au mouvement orbital en présence d'un faible champ magnétique.

On trouve [81]

$$K_0(\vec{r}, \vec{r}', t) = \left(\frac{m^*}{2 \pi i \hbar t} \right)^{3/2} \frac{e^{i \omega^* t}}{2 \sin \frac{\omega^* t}{2}} \exp \left[\frac{i m^*}{2 \hbar} \left\{ \frac{(z - z')^2}{t} + \frac{\omega^*}{2} \cot \left(\frac{\omega^* t}{2} \right) [(x - x')^2 + (y - y')^2] - \omega^* (x y' - y x') \right\} \right] \quad (\text{II. 16})$$

où $\omega^* = \frac{eH}{m^* c}$ est la fréquence cyclotronique angulaire.

A partir des équations (II. 16), (II. 15), (II. 7) et (II. 6), on obtient pour $\vec{r}(t) = \vec{r}(0)$ la densité d'états

$$N(E, H) = \frac{1}{2 \pi \hbar^2} \left(\frac{\sqrt{2}}{\sigma} \right)^{1/2} (2 m^*)^{3/2} \omega^* \sum_{n=0}^{\infty} \exp \left(-\frac{(E - M)^2}{2 \sigma^2} \right) D_{-1/2} \left\{ \frac{\sqrt{2}}{\sigma} (E - M) \right\}. \quad (\text{II. 17})$$

où $M = (n+1/2) \hbar \omega^*$ avec le nombre quantique de Landau n et où $D_{-1/2}(x)$ est la fonction "parabolique cylindrique".

Dans l'étude des propriétés de transport nous aurons besoin des renseignements spectraux sur la fonction de Green (ou de la densité spectrale). Celle-ci est représentée par la partie imaginaire de la moyenne de la fonction de Green $\text{Im} \langle G_{n, k_z}(E) \rangle$ dans les états quantiques n et k_z où k_z est la composante du vecteur d'onde dirigé suivant l'axe des z). On peut déduire de la formule (II. 17)

$$\text{Im} \langle G_{n, k_z}(E) \rangle = -\frac{2\sqrt{2\pi}}{(2\pi l)\sigma} \exp \left[-\frac{\left\{ E - (n + 1/2)\hbar\omega^* - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \right\}^2}{2\sigma^2} \right], \quad (\text{II. 18})$$

où l est le rayon cyclotronique correspondant au niveau de Landau le plus bas [33],

$$l = \left(\frac{eH}{\hbar c} \right)^{-1/2} \quad (\text{II. 19})$$

et où les valeurs $E_{n, k_z} = (n + 1/2)\hbar\omega^* + \hbar^2 k_z^2 / 2m^*$ sont les valeurs propres de l'opérateur $\mathcal{H}_0$.

En effet, à partir de la densité spectrale, on peut retrouver la densité d'états par

$$N(E) = 2 \left(\frac{1}{2\pi l} \right) \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} dk_z \left\{ -\frac{\text{Im} \langle G_{n, k_z}(E) \rangle}{2\pi} \right\},$$

remarquant que

$$D_\nu(z) = \frac{e^{-z^2/4}}{\Gamma(-\nu)} \int_0^{\infty} t^{-\nu-1} e^{-(t^2/2+zt)} dt. \quad (\text{II. 20})$$

Dans l'équation (II. 17), $D_\nu(x)$ peut être reliée aux fonctions de Kummer ${}_1F_1(a; c; y)$ par la formule

$$D_\nu(x) = 2^{\nu/2} e^{-x^2/4} \left\{ \frac{\Gamma(1/2)}{\Gamma([1-\nu]/2)} {}_1F_1\left(-\frac{\nu}{2}; \frac{1}{2}; \frac{x^2}{2}\right) + \frac{x}{\sqrt{2}} \cdot \frac{\Gamma(-1/2)}{\Gamma(-\nu/2)} {}_1F_1\left(\frac{1-\nu}{2}; \frac{3}{2}; \frac{x^2}{2}\right) \right\},$$

$$(\text{II. 21})$$

La fonction ${}_1F_1(a; b; y)$ est représentable en série infinie conformément à la relation [20, 84]

$${}_1F_1(a; c; y) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(a)_m}{(c)_m} \frac{y^m}{m!} = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+m)}{\Gamma(c+m)} \frac{y^m}{m!}, \quad (\text{II. 22})$$

avec $c \neq 0, -1, -2, \dots$.

Dans la formule (II. 21), les fonctions de Kummer convergent pour tout y .

D'autre part, on sait que

$$D_\nu(x) \approx x^\nu \exp(-x^2/4) \quad \text{quand} \quad x \rightarrow +\infty. \quad (\text{II. 23})$$

Donc, l'équation (II. 17) devient

$$N(E, H) = \frac{(2m^*)^{3/2} \omega^*}{2\pi \hbar^2 \Gamma(3/4) \Gamma(1/4) \sqrt{\sigma}} \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{1}{m! 2^m} \times \\ \times \left\{ \frac{[\Gamma(1/2)]^2 \Gamma(m+1/4)}{\Gamma(m+1/2)} x^{2m} - \frac{\sqrt{2\pi} \Gamma(3/2) \Gamma(m+3/4)}{\Gamma(m+3/2)} x^{2m+1} \right\} e^{-x^2/2}, \quad (\text{II. 24})$$

avec $x = \left\{ \frac{(M-E)\sqrt{2}}{\sigma} \right\} \in]-\infty, +\infty[$, et

$$N(E, H) \approx \frac{1}{2\pi \hbar^2} \left(\frac{\sqrt{2}}{\sigma} \right)^{1/2} (2m^*)^{3/2} \omega^* \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{-x^2/2}}{\sqrt{x}} \quad \text{quand} \quad x \rightarrow +\infty. \quad (\text{II. 25})$$

B - Densité d'états dans un faible champ magnétique .

Pour un faible champ magnétique (ou $\hbar\omega^* \ll \sigma$), la variation des termes dans l'équation (II. 24), qui correspond à une variation de n égale à 1 est très petite; ainsi l'emploi de la seconde formule de sommation d'Euler est possible [20, 31, 85] :

$$\sum_{n=0}^{\infty} f\left(n + \frac{1}{2}\right) = \int_0^{+\infty} f(n) \, dn + \frac{1}{24} (f'(0) - f'(\infty)) + \dots \quad (\text{II. 26})$$

Les termes non écrits seront négligés dans l'approximation des faibles champs magnétiques ($\hbar \omega^* \ll \sigma$). On a :

$$f(n) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left\{ \frac{[\Gamma(1/2)]^2 \Gamma(m+1/4)}{\Gamma(m+1/2)} \left(\frac{n \hbar \omega^* - E}{\sigma} \right)^{2m} - \frac{2\sqrt{\pi} \Gamma(3/2) \Gamma(m+3/4)}{\Gamma(m+3/2)} \left(\frac{n \hbar \omega^* - E}{\sigma} \right)^{2m+1} \right\} \exp\left(\frac{n \hbar \omega^* - E}{\sigma} \right)^2 \quad (\text{II. 27})$$

et

$$\begin{aligned} f'(0) &= \frac{\hbar \omega^*}{\sigma} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \cdot \\ &\times \left\{ \frac{2 [\Gamma(1/2)]^2 \Gamma(m+1/4)}{\Gamma(m+1/2)} \left(\frac{E}{\sigma} \right)^{2m+1} + \frac{4\sqrt{\pi} \Gamma(3/2) \Gamma(m+3/4)}{\Gamma(m+3/2)} \left(\frac{E}{\sigma} \right)^{2m+2} - \right. \\ &\quad - \frac{[\Gamma(1/2)]^2 \Gamma(m+1/4)}{\Gamma(m+1/2)} 2m \left(\frac{E}{\sigma} \right)^{2m-1} - \\ &\quad \left. - \frac{2\sqrt{\pi} \Gamma(3/2) \Gamma(m+3/4)}{\Gamma(m+3/2)} (2m+1) \left(\frac{E}{\sigma} \right)^{2m} \right\} \exp\left(-\frac{E^2}{\sigma^2} \right). \end{aligned} \quad (\text{II. 28})$$

D'autre part, lorsque n tend vers $+\infty$, on utilise l'expression (II. 25),

$$f(n) \approx \frac{\exp\left[-\left(\frac{n \hbar \omega^* - E}{\sigma} \right)^2 \right]}{2^{1/4} \cdot \left(\frac{n \hbar \omega^* - E}{\sigma} \right)^{1/2}} \quad \text{puis} \quad f'(\infty) \rightarrow 0. \quad (\text{II. 29})$$

L'intégrale dans la formule (II. 26) peut être calculée en écrivant

$$\int_0^{\infty} f(n) dn = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \int_0^{\infty} dn \left\{ \frac{[\Gamma(1/2)]^2 \Gamma(m+1/4)}{\Gamma(m+1/2)} \left(\frac{n \hbar \omega^* - E}{\sigma} \right)^{2m} - \frac{2\sqrt{\pi} \Gamma(3/2) \Gamma(m+3/4)}{\Gamma(m+3/2)} \left(\frac{n \hbar \omega^* - E}{\sigma} \right)^{2m+1} \right\} \exp \left(\frac{n \hbar \omega^* - E}{\sigma} \right). \quad (\text{II. 30})$$

Posant $x = (n \hbar \omega^* - E) / \sigma$ et utilisant la définition de la fonction Gamma incomplète

$$\Gamma(v; u) = \int_u^{\infty} x^{v-1} e^{-x} dx, \quad (\text{II. 31})$$

nous obtenons

$$\int_0^{\infty} f(n) dn = \frac{\sigma}{2 \hbar \omega^*} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left\{ \frac{[\Gamma(1/2)]^2 \Gamma(m+1/4)}{\Gamma(m+1/2)} \Gamma \left(m + \frac{1}{2}; \left(-\frac{E}{\sigma} \right)^2 \right) - \frac{2\sqrt{\pi} \Gamma(3/2) \Gamma(m+3/4)}{\Gamma(m+3/2)} \Gamma \left((m+1); \left(-\frac{E}{\sigma} \right)^2 \right) \right\}, \quad (\text{II. 32})$$

où $\Gamma(v; u)$ peut être exprimée sous la forme [20, 31, 86]

$$\Gamma(v; u) = \Gamma(v) - \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{l!} \frac{u^{v+l}}{(v+l)} \quad \text{si } |u| < 1, \quad (\text{II. 33})$$

et la forme

$$\Gamma(v; u) \approx u^{v-1} e^{-u} \quad \text{si } |u| > 1. \quad (\text{II. 34})$$

Finalement la densité d'états calculée jusqu'au second ordre en ω^* (ou H) est obtenue à partir des équations (II.24) et (II. 26) :

$$\begin{aligned}
N(E, H) &\approx \frac{(2 m^*)^{3/2} \sqrt{\sigma}}{4 \pi \hbar^3 \Gamma(3/4) \Gamma(1/4)} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \times \\
&\times \left\{ \frac{[\Gamma(1/2)]^2 \Gamma(m+1/4)}{\Gamma(m+1/2)} \Gamma\left(m+\frac{1}{2}; \left(-\frac{E}{\sigma}\right)^2\right) - \right. \\
&- \frac{2\sqrt{\pi} \Gamma(3/4) \Gamma(m+3/4)}{\Gamma(m+3/2)} \Gamma\left(m+1; \left(-\frac{E}{\sigma}\right)^2\right) \Big\} + \\
&+ \frac{(2 m^*)^{3/2} (\hbar \omega^*)^2}{48 \pi \hbar^3 \Gamma(3/4) \Gamma(1/4) \sigma^{3/2}} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \times \\
&\times \left\{ \frac{2 [\Gamma(1/2)]^2 \Gamma(m+1/4)}{\Gamma(m+1/2)} \left(\frac{E}{\sigma}\right)^{2m+1} + \frac{4\sqrt{\pi} \Gamma(3/2) \Gamma(m+3/4)}{\Gamma(m+3/2)} \left(\frac{E}{\sigma}\right)^{2m+2} - \right. \\
&- \frac{[\Gamma(1/2)]^2 \Gamma(m+1/4)}{\Gamma(m+1/2)} 2m \left(\frac{E}{\sigma}\right)^{2m-1} - \\
&- \frac{2\sqrt{\pi} \Gamma(3/2) \Gamma(m+3/4)}{\Gamma(m+3/2)} (2m+1) \left(\frac{E}{\sigma}\right)^{2m} \Big\} \exp\left[-\left(\frac{E}{\sigma}\right)^2\right] \quad (\text{II. 35})
\end{aligned}$$

ou

$$N(E, H) \approx N^{(0)}(E) + N_{\text{orb}}^{(2)}(E, H), \quad (\text{II. 36})$$

où $N^{(0)}(E)$ est la densité d'états en l'absence de champ magnétique et $N_{\text{orb}}^{(2)}(E, H)$ représente la dépendance en H^2 de la densité d'états pour le mouvement orbital. Tenant compte de l'expression (II. 33), $N^{(0)}(E)$ peut s'écrire [34]

$$\begin{aligned}
N^{(0)} &= P \sqrt{\sigma} \left\{ \sum_{m=0}^{\infty} c(m) + \sum_{m,l=0}^{\infty} c(m, l) \left(\frac{E}{\sigma}\right)^{2m+2l+1} + \sum_{m,l=0}^{\infty} c'(m, l) \left(\frac{E}{\sigma}\right)^{2m+2l+2} \right\} \approx \\
&\approx \frac{1.79 (2 m_C^*)^{3/2}}{4 \pi \hbar^3} \sqrt{\sigma} \left\{ 1 + 1.60 \left(\frac{E}{\sigma}\right) + 0.54 \left(\frac{E}{\sigma}\right)^2 - 0.28 \left(\frac{E}{\sigma}\right)^3 \right\}
\end{aligned}$$

$$\text{pour } \left| \frac{E}{\sigma} \right| < 1, \quad (\text{II. 37})$$

où

$$\begin{aligned}
P &= \frac{(2 m_C^*)^{3/2}}{4 \pi \hbar^3 \Gamma(3/4) \Gamma(1/4)}, \quad c(m) = \frac{\delta_1 \Gamma(m+1/2) - \delta_2 \Gamma(m+1)}{m!}, \\
c(m, l) &= \frac{(-1)^l \delta_1}{m! l! (m+l+1/2) (2m+2l+2)}, \\
c'(m, l) &= \frac{(-1)^l \delta_2}{m! l! (m+l+1) (2m+2l+3)},
\end{aligned}$$

avec

$$\delta_1 = \frac{[\Gamma(1/2)]^2 \Gamma(m+1/4)}{\Gamma(m+1/2)}, \quad \delta_2 = \frac{2\sqrt{\pi} \Gamma(3/2) \Gamma(m+3/4)}{\Gamma(m+3/2)}.$$

Nous tenons compte maintenant de l'effet du faible champ magnétique H sur le spin électronique $\vec{s}$ (ou l'effet Zeeman représenté par le terme $g \mu_B^* \vec{H} \cdot \vec{s}$). Pour cela , il suffit de remplacer (E/σ) dans l'expression (II. 37) par $(E \pm g \mu_B^* H/2)/\sigma$ et la contribution de spin à la densité d'états pour les deux orientations du spin vers le haut et vers le bas s'écrit jusqu'au second ordre en H [33]

$$\begin{aligned} 2 N_{\text{spin}}^{(2)}(E, H) &= \frac{2\pi l}{2!} \left(\frac{g^* \mu_B^* H}{2\sigma} \right)^2 \frac{d^2 N^{(0)}(E)}{d(E/\sigma)^2} = \\ &= \left(\frac{g^* \mu_B^* H}{2\sigma} \right)^2 P \sqrt{\sigma} \left\{ \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l \delta_1}{m! l!} \left(\frac{E}{\sigma} \right)^{2m+2l-1} (2m+2l) + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l \delta_2}{m! l!} \left(\frac{E}{\sigma} \right)^{2m+2l} (2m+2l+1) \right\}. \end{aligned}$$

(II. 38)

Dans cette expression , il n'y a pas de terme linéaire en H car les contributions de deux orientations du spin vers le haut et vers le bas se compensent .

Pour $E < -\sigma$ et $H = 0$, tenant compte des équations (II. 21) et (II. 34), la densité d'états $N^{(0)}(E)$ dans l'équation (II. 35) prend la forme

$$N^{(0)} \approx \frac{(2 m_C^*)^{3/2} \sqrt{\sigma} (2)^{1/4}}{4 \pi \hbar^3} \left(-\frac{E}{\sigma} \right)^{-1} \exp \left(-\frac{E^2}{2\sigma^2} \right) D_{-1/2} \left(-\frac{E\sqrt{2}}{\sigma} \right) .$$

En utilisant l'expression (II. 23) , on obtient pour $E < -\sigma$

$$N^{(0)} \approx \frac{(2 m_C^*)^{3/2} \sqrt{\sigma}}{4 \pi \hbar^3} \left(-\frac{E}{\sigma} \right)^{-3/2} \exp \left[-\left(\frac{E}{\sigma} \right)^2 \right]. \quad (\text{II. 39})$$

Sur la figure 1 , on a tracé les deux courbes correspondant à (II. 37) pour $|E/\sigma| < 1$ et (II. 39) pour $E < -\sigma$; elles se rejoignent sensiblement quand E est à peu près égale à $-\sigma$.

Pour la dépendance vis-à-vis d'un faible champ magnétique , les équations (II. 35) et (II. 38) donnent , avec $|E/\sigma| < 1$,

$$\begin{aligned}
N(E, H) &= N^{(0)}(E) + N_{\text{orb.}}^{(2)}(E, H) + N_{\text{spin}}^{(2)}(E, H) \\
&\approx 8P \left\{ 1 + 1.60 \left(\frac{E}{\sigma} \right) + 0.54 \left(\frac{E}{\sigma} \right)^2 - 0.28 \left(\frac{E}{\sigma} \right)^3 - \right. \\
&\quad \left. - 0.18 \left(\frac{\mu_B^* H}{\sigma} \right)^2 + 0.135 \left(\frac{g^* \mu_B^* H}{\sigma} \right)^2 \right\}.
\end{aligned}
\tag{II. 40}$$

Pour des électrons de conduction de très faibles masses effectives la contribution du spin à la densité d'états est très faible par rapport à celle du mouvement orbital, de telle sorte que la densité d'états pour une énergie E donnée décroît légèrement quand le champ magnétique croît. Cette conclusion est en bon accord avec celle de Lukes et ses collaborateurs [18].

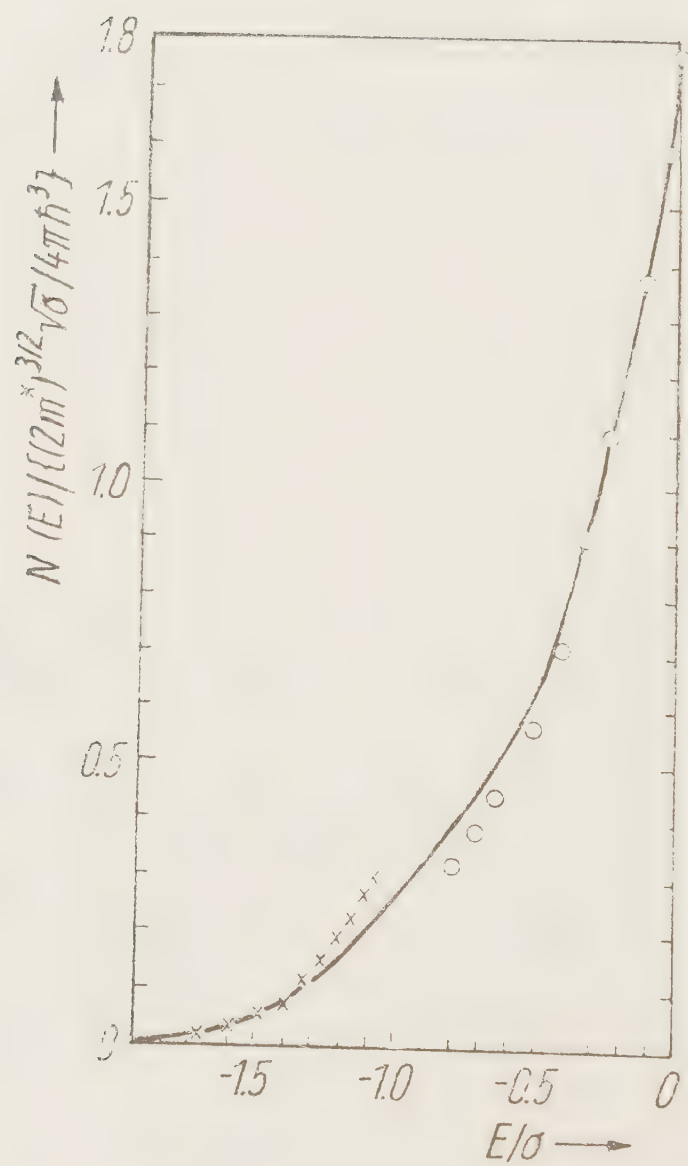


Fig. 1

III . ENERGIE DE FERMİ ET LONGUEUR D'ECRAN

A - Energie de Fermi .

Au zéro absolu et dans un champ magnétique nul , la concentration totale en électrons supposée connue est définie par

$$\begin{aligned} n_0 &= 2 \int_{-\infty}^{E_0} g^{(0)}(E) dE \\ &= n_1 + 2 \int_0^{E_0} N^{(0)}(E) dE \end{aligned} \quad , \quad (\text{III. 1})$$

où 2 est le facteur de dégénérescence de spin , E_0 l'énergie de Fermi pour $T = H = 0$ et

$$n_1 = 2 \int_{-\infty}^0 N^{(0)}(E) dE \quad . \quad (\text{III. 2})$$

Dans l'intervalle d'intégration , $[-\infty , 0]$, la densité d'états ne peut être mise sous une seule forme analytique (cf. équations (II. 37) et (II. 39)) ; on ne peut donc pas calculer exactement cette intégrale [29] . Nous allons la calculer numériquement .

D'abord , tenant compte de l'équation (II. 37) , on obtient

$$2 \int_0^{E_0} N^{(0)}(E) dE \approx 16P\sigma^{3/2} \left\{ \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + 0.80 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^2 + 0.18 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^3 \right\} \quad , \quad (\text{III. 3})$$

pour $|E_0/\sigma| < 1$. L'équation (III. 1) devient donc (cf. figure 2)

$$n_0 \approx 16P\sigma^{3/2} \left\{ \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + 0.80 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^2 + 0.18 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^3 \right\} + n_1 \quad . \quad (\text{III. 4})$$

A partir de la figure 2 , nous adoptons une valeur approchée de n_1 : $n_1 \approx 0.35(16P\sigma^{3/2})$. On peut pratiquement négliger la contribution correspondant à $E_0 < -\sigma$ ou à un effet de compensation des donneurs par les accepteurs très important . Il est exclu de notre étude car notre modèle ne s'appliquerait pas à une telle situation .

A une température finie $T^\circ K$ et pour un faible champ magnétique H , la concentration en électrons est donnée par

$$\begin{aligned} n_0 &= 2 \int_{-\infty}^{+\infty} N(E, H) f(E) dE \quad , \\ &= 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\int_{-\infty}^E N(E', H) dE' \right) \left\{ - \frac{\partial f(E)}{\partial E} \right\} dE \quad , \end{aligned} \quad (\text{III. 5})$$

où $f(E)$ est la fonction de distribution de Fermi-Dirac ,

$$f(E) = 1 / \left(\exp \frac{E - E_F}{kT} + 1 \right) ,$$

E_F étant l'énergie de Fermi qui dépend de la température T et du champ magnétique H .

L'équation (III. 5) peut se décomposer en trois parties comme suit [20, 33] :

$$n_o = n_o^{(o)} + n_{o, orb.}^{(2)} + n_{o, spin}^{(2)} . \quad (III. 6)$$

Dans l'équation (III. 6) , on a

$$n_o^{(o)} = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\int_0^E N^{(o)}(E') dE' \right) \left\{ - \partial f(E) / \partial E \right\} dE + n_1$$

et l'on trouve

$$\begin{aligned} n_o &= \frac{2 (2 m^*)^{3/2} \sqrt{\sigma}}{4 \pi \hbar^3 \Gamma(3/4) \Gamma(1/4)} \times \\ &\times \left\{ \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left[\left[\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \right]^2 \Gamma\left(m + \frac{1}{4}\right) - \frac{2 \sqrt{\pi} \Gamma(3/2) \Gamma(m + 3/4) \Gamma(m + 1)}{\Gamma(m + 3/2)} \right] E_F + \right. \\ &+ \sum_{m, l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{m! l!} \sum_{\mu=0, 2, \dots}^{p=2m+2l+2} \frac{2 [\Gamma(1/2)]^2 \Gamma(m + 1/4) C_p^{\mu}(kT)^{\mu} E_F^{p-\mu} \pi^{\mu} (2^{\mu} - 2)}{\sigma^{2m+2l+1} (2m + 2l + 2) (2m + 2l + 1) \Gamma(m + 1/2)} B_{\mu/2} + \\ &+ \sum_{m, l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{m! l!} \times \\ &\times \left. \sum_{\mu'=0, 2, \dots}^{p'=2m+2l+3} \frac{2 \sqrt{\pi} \Gamma(3/2) \Gamma(m + 3/4) C_p^{\mu'}(kT)^{\mu'} E_F^{p'-\mu'} (2^{\mu'} - 2) \pi^{\mu'}}{\sigma^{2m+2l+2} (m + l + 1) (2m + 2l + 3) \Gamma(m + 3/2)} B_{\mu'/2} \right\} + n_1 \end{aligned}$$

ou

$$n_o^{(o)} \approx 16 P \sqrt{\sigma} \left\{ E_F + 0.80 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right) E_F + 0.18 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right)^2 E_F + 0.26 \frac{(kT)^2}{\sigma} \right\} + n_1$$

pour $\left| E_F / \sigma \right| < 1$ et $(\pi kT / \sigma) < 1$ (III. 7) ,

en remarquant qu'à basse température [20]

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{(E - E_F)/kT} E^p dE}{kT (e^{(E - E_F)/kT} + 1)^2} = \\ &= E_F^p \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{\gamma}}{(e^{\gamma} + 1)^2} \left(\frac{kT \gamma}{E_F} + 1 \right)^p d\gamma = \sum_{\mu=0}^p C_p^{\mu} (kT)^{\mu} E_F^{p-\mu} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{\gamma} \gamma^{\mu}}{(e^{\gamma} + 1)^2} d\gamma . \end{aligned} \quad (III. 8)$$

avec

$$C_p^{\mu} = \frac{p!}{(p - \mu)! \mu!} , \quad I_{\mu} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{\gamma} \gamma^{\mu}}{(e^{\gamma} + 1)^2} d\gamma = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\gamma^{\mu} d\gamma}{(e^{\gamma/2} + e^{-\gamma/2})^2} .$$

Cette dernière intégrale s'annule quand μ est impaire . Pour les valeurs paires de μ , on obtient

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} I_{\mu} &= \sum_{s=1}^{\infty} (-1)^{s-1} s \int_0^{\infty} \gamma^{\mu} e^{-\gamma} d\gamma = \mu! \sum_{s=1}^{\infty} \frac{(-1)^{s-1}}{s^{\mu}} = \\ &= \mu! (1 - 2^{1-\mu}) \zeta(\mu) = (2^{\mu-1} - 1) \pi^{\mu} B_{\mu/2} , \end{aligned} \quad (\text{III. 9})$$

où $B_{\mu/2}$ sont les nombres de Bernoulli ; les premières valeurs sont $B_0 = -1$ (puis $B_1 = 1/6$, $B_2 = 1/30$ et $B_3 = 1/42$.

La contribution orbitale en présence d'un faible champ magnétique , en tenant compte de l'équation (II.35) , est [33]

$$n_{0, \text{orb}}^{(2)} = 2 \int_{-\infty}^{\infty} dE \left\{ - \frac{\partial f(E)}{\partial E} \right\} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} N_{\text{orb}}^{(2)} \left(\frac{E'}{\sigma}, H \right) dE' \right\} ,$$

et à basse température

$$\begin{aligned} n_{0, \text{orb}} &= \frac{(2 m^*)^{3/2}}{6 \pi \hbar^3} \frac{1}{\Gamma(\frac{3}{4}) \Gamma(\frac{1}{4}) \sigma} \left[\sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \{ m \delta_1 \Gamma(m) + (m+1/2) \delta_2 \Gamma(m+1/2) - \right. \\ &\quad \left. - \delta_1 \Gamma(m+1) \delta_2 \Gamma(m+3/2) \} + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l \delta_1}{m! l! \sigma^{2m+2l}} \left\{ \sum_{\mu=0, 2, \dots}^{p=2m+2l+2} \frac{C_p^{\mu} (k_B T)^{\mu} E_F^{p-\mu} (2^{\mu}-2) \pi^{\mu}}{\sigma^2 (m+l+1)} B_{(1/2)\mu} - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \sum_{\mu'=0, 2, \dots}^{p'=2m+2l} C_{p'}^{\mu'} (k_B T)^{\mu'} E_F^{p'-\mu'} \left(\frac{m}{m+l} \right) (2^{\mu'}-2) \pi^{\mu'} B_{(1/2)\mu'} \right\} + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l \delta_2}{m! l! \sigma^{2m+2l+1}} \left\{ \sum_{\mu=0, 2, \dots}^{p=2m+2l+3} \frac{C_p^{\mu} (k_B T)^{\mu} E_F^{p-\mu} (2^{\mu}-2) \pi^{\mu}}{\sigma^2 (m+l+3/2)} B_{(1/2)\mu} - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \sum_{\mu'=0, 2, \dots}^{p'=2m+2l+1} C_{p'}^{\mu'} (k_B T)^{\mu'} E_F^{p'-\mu'} \left(\frac{2m+1}{2m+2l+1} \right) (2^{\mu'}-2) \pi^{\mu'} B_{(1/2)\mu'} \right\} \right] . \end{aligned} \quad (\text{III. 10})$$

La contribution du spin , en tenant compte de l'expression (II.38) , est [33]

$$\begin{aligned} n_{0, \text{spin}} &= 2 \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left\{ - \frac{\partial f(E)}{\partial E} \right\} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} N_{\text{spin}}^{(2)}(E, H) dE \right\} = 2 P \sqrt{\sigma} \left(\frac{g^* \mu_B^* H}{2 \sigma} \right)^2 \times \\ &\quad \times \left[\sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l \delta_1}{m! l!} \sum_{\mu=0, 2, \dots}^{p=2m+2l} \frac{C_p^{\mu} (k_B T)^{\mu} E_F^{p-\mu} (2^{\mu}-2) \pi^{\mu}}{\sigma^{2m+2l-1}} B_{(1/2)\mu} + \right. \\ &\quad \left. \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l \delta_2}{m! l!} \sum_{\mu'=0, 2, \dots}^{p'=2m+2l+1} \frac{C_{p'}^{\mu'} (k_B T)^{\mu'} E_F^{p'-\mu'} (2^{\mu'}-2) \pi^{\mu'}}{\sigma^{2m+2l}} B_{(1/2)\mu'} \right] . \end{aligned} \quad (\text{III. 11})$$

Le résultat global n_0 à la température T et pour un champ magnétique H , est donc

$$n_0(T, \rho, H) \approx 16P\sqrt{\sigma} \left\{ E_F + 0.8 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right) E_F + 0.18 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right)^2 E_F + \right. \\ \left. + 0.26 \frac{(\pi kT)^2}{\sigma} - 0.26 \frac{(\mu_B^* H)^2}{\sigma} - 0.80 \left(\frac{g^* \mu_B^* H}{2} \right)^2 \frac{1}{\sigma} \right\} + n_1. \quad (\text{III. 12})$$

En comparant cette équation avec l'équation (III. 4), on trouve

$$E_F \approx E_0 - 0.26 \frac{(\pi kT)^2}{\sigma} + 0.26 \frac{(\mu_B^* H)^2}{\sigma} - 0.80 \left(\frac{g^* \mu_B^* H}{2} \right)^2 \frac{1}{\sigma}. \quad (\text{III. 13})$$

Pour σ et H donnés, le niveau de Fermi décroît légèrement quand la température augmente. Cette conclusion est en bon accord avec les résultats de Haas [13] pour le germanium de type n et avec ceux de Hwang et Brews [87] pour l'arseniure de gallium de type n.

B - Longueur d'écran électronique.

Revenons à la relation (II. 14) : $\sigma^2 = 2\pi\rho L e^4 \varepsilon^{-2}$, où σ est le coefficient qui caractérise les impuretés, lié à leur concentration ρ et la longueur d'écran L . Cette relation permet d'éliminer un de deux paramètres σ et ρ à condition d'exprimer la longueur d'écran. En adoptant l'approximation de Thomas-Fermi [20, 88] et en considérant un effet d'écran purement électronique, la longueur d'écran, notée alors L_e , est donnée par [33]

$$L_e^{-2} = \frac{8\pi e^2}{\varepsilon} \int_{-\infty}^{+\infty} N(E, H) \left\{ -\partial f(E)/\partial E \right\} dE, \\ \approx L_{e,0}^{-2} + L_{e,\text{orb.}}^{-2} + L_{e,\text{spin}}^{-2}, \quad (\text{III. 14})$$

où

$$L_{e,0}^{-2} = \frac{8\pi e^2}{\varepsilon} \int_{-\infty}^{+\infty} N^{(0)}(E) \left\{ -\partial f(E)/\partial E \right\} dE, \\ L_{e,\text{orb.}}^{-2} = \frac{8\pi e^2}{\varepsilon} \int_{-\infty}^{+\infty} N_{\text{orb.}}^{(2)}(E, H) \left\{ -\partial f(E)/\partial E \right\} dE$$

et
$$L_{e, \text{spin}}^{-2} = \frac{8 \pi e^2}{\varepsilon} \int_{-\infty}^{+\infty} N_{\text{spin}}^{(2)}(E, H) \left\{ - \partial f(E) / \partial E \right\} dE .$$

En tenant compte des équations (II. 35) et (II. 38) , on obtient

$$L_e = \frac{1}{2^{3/2} e} \left(\frac{\varepsilon}{8 \pi P} \right)^{1/2} \sigma^{-1/4} \left\{ 1 - 0.80 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + 0.69 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^2 + 0.11 \left(\frac{\pi k T}{\sigma} \right)^2 - \right. \\ \left. - 0.08 \left(\frac{g^* \gamma_{\beta H}}{\sigma} \right)^2 - 0.39 \left(\frac{g^* \gamma_{\beta H}}{2 \sigma} \right)^2 + \dots \right\} . \quad (\text{III. 15})$$

En remplaçant L_e par sa valeur dans la relation (II. 14) , on a

$$\sigma = \frac{\rho_e^{4/3}}{\varepsilon^{2/3}} \left(\frac{\pi}{16 P} \right)^{2/9} \left\{ 1 - 0.35 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + 0.22 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^2 + 0.05 \left(\frac{\pi k T}{\sigma} \right)^2 - \right. \\ \left. - 0.04 \left(\frac{g^* \gamma_{\beta H}}{\sigma} \right)^2 - 0.17 \left(\frac{g^* \gamma_{\beta H}}{2 \sigma} \right)^2 + \dots \right\} \quad (\text{III. 16})$$

ou , en posant $A = e^{4/3} \pi^{2/9} / (\varepsilon^{2/3} 16^{2/9} P^{2/9})$,

$$\rho = \left(\frac{\sigma}{A} \right)^{9/4} \left\{ 1 + 0.80 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) - 0.05 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^2 - 0.12 \left(\frac{\pi k T}{\sigma} \right)^2 + \right. \\ \left. + 0.09 \left(\frac{g^* \gamma_{\beta H}}{\sigma} \right)^2 + 0.38 \left(\frac{g^* \gamma_{\beta H}}{2 \sigma} \right)^2 + \dots \right\} . \quad (\text{III. 17})$$

D'autre part , l'énergie potentielle moyenne V_0 donnant le zéro de l'énergie définie à partir de la relation (II. 13) est

$$V_0 = - \frac{\rho^{7/9}}{16 P A^{1/2}} \left\{ 1 - 1.60 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + 1.38 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^2 + 0.22 \left(\frac{\pi k T}{\sigma} \right)^2 - \right. \\ \left. - 0.16 \left(\frac{g^* \gamma_{\beta H}}{\sigma} \right)^2 - 0.78 \left(\frac{g^* \gamma_{\beta H}}{2 \sigma} \right)^2 + \dots \right\} . \quad (\text{III. 18})$$

Nous pouvons conclure ici que , pour un champ H constant et pour un dopage ρ donné , la longueur d'écran L_e , le coefficient σ et l'énergie potentielle moyenne V_0 croissent légèrement en valeur absolue quand la température T augmente . Cette conclusion est en bon accord avec celle de Hwang et Brews concernant l'étude de l'énergie moyenne V_0 pour le semi-conducteur n-GaAs [87] .

C - Discussion .

Dans cette section nous allons discuter deux cas typiques de semi-conducteurs [20, 21, 28 à 34] avec un effet d'écran purement électronique et avec un effet d'écran dû non seulement aux électrons mais aussi aux ions .

C.1 - Effet d'écran purement électronique .

(i) En l'absence d'accepteurs et envisageant seulement le problème aux basses températures , nous considérons le cas [20] où les électrons , de densité n_o , proviennent des impuretés à raison d'un électron par atome d'impureté ($n_o = \rho$) .

En présence d'accepteurs produisant une compensation partielle des donneurs , nous prenons $n_o = \rho - n_a$, où n_a est la densité des accepteurs . La relation (II.14) devient :

$$\sigma^2 = 2\pi \rho^* L_e e^4 \varepsilon^{-2} , \quad (\text{III.19})$$

où nous prenons $\rho^* = \rho + n_a$ pour tenir compte du nombre total de centres diffusants pour les électrons , en admettant le même potentiel , au signe près , pour les centres donneurs et accepteurs ionisés . De même, pour les équations (III.16) et (III.17) , on a

$$\sigma = A(\rho^*)^{4/9} \left\{ 1 - 0.35\left(\frac{E_o}{\sigma}\right) + 0.22\left(\frac{E_o}{\sigma}\right)^2 + 0.05\left(\frac{\pi kT}{\sigma}\right)^2 - 0.04\left(\frac{\mu_o^* H}{\sigma}\right)^2 - 0.17\left(\frac{g^* \mu_o^* H}{2\sigma}\right)^2 + \dots \right\} , \quad (\text{III.16})'$$

$$\rho^* = \left(\frac{\sigma}{A}\right)^{9/4} \left\{ 1 + 0.80\left(\frac{E_o}{\sigma}\right) - 0.05\left(\frac{E_o}{\sigma}\right)^2 - 0.12\left(\frac{\pi kT}{\sigma}\right)^2 + 0.09\left(\frac{\mu_o^* H}{\sigma}\right)^2 + 0.38\left(\frac{g^* \mu_o^* H}{2\sigma}\right)^2 + \dots \right\} . \quad (\text{III.17})'$$

Pour simplifier , nous développons le raisonnement seulement pour un champ H nul . En tenant compte de l'hypothèse $n_o = \rho - n_a$, on peut alors exprimer (E_o/σ) à partir des équations (III.12) et (III.17)' sous la forme approchée d'un développement limité au second ordre en (E_o/σ) et $(\pi kT/\sigma)$. Cette expression approchée sera notée $(E_o/\sigma)^{(2,2)}$ et on trouve

$$\left(\frac{E_o}{\sigma}\right)^{(2,2)} = \alpha(\rho^*)^{1/3} \left\{ 1 - 0.40y - 0.04x^2 - 0.08\left(\frac{\pi kT}{A}\right)^2 (\rho^*)^{-8/9} \right\} - \theta \left\{ 1 - 0.80y + 0.46x^2 \right\} , \quad (\text{III.20})$$

où $x = \alpha(\rho^*)^{1/3} - \theta$, $y = x(1 - 0.40\alpha(\rho^*)^{1/3} + 0.80\theta)$ avec

$$\alpha = \frac{A^{3/4} \epsilon^{3/2}}{(2\pi)^{1/2} e^3 (8P)^{1/2}} \quad \text{et} \quad \theta = 0.35 + \frac{2n_a}{16PA^{3/2}(\rho^*)^{2/3}}.$$

Les accepteurs provoquent donc un abaissement du niveau de Fermi .

La condition de validité de l'approximation $|E_o/\sigma| < 1$ équivaut pratiquement à

$$\rho^* < 5 \times 10^{25} \left(\frac{m^*}{m_0 \epsilon} \right)^3 (1 + \theta)^3 \text{ cm}^{-3}.$$

où m_0 est la masse de l'électron libre .

La notation $<$ implique un écart pas trop réduit entre les deux quantités concernées . Cette remarque sera valable pour beaucoup d'autres inégalités.

Dans cette approximation , on obtient donc

$$L_e \approx \frac{1}{2^{3/2} \epsilon A^{1/4}} \left(\frac{\epsilon}{8\pi P} \right)^{1/2} (\rho^*)^{-1/9} \left\{ 1 - 0.71 \left(\frac{E_o}{\sigma} \right)^{(2,2)} + 0.66x^2 + 0.11 \left(\frac{\pi kT}{A \rho^{*4/9}} \right)^2 \right\} \quad (\text{III. 21})$$

$$\sigma \approx A(\rho^*)^{4/9} \left\{ 1 - 0.35 \left(\frac{E_o}{\sigma} \right)^{(2,2)} + 0.22x^2 + 0.05 \left(\frac{\pi kT}{A \rho^{*4/9}} \right)^2 \right\} \quad (\text{III. 22})$$

et

$$V_o \approx - \frac{(\rho^*)^{7/9}}{16PA^{1/2}} \left\{ 1 - 1.60 \left(\frac{E_o}{\sigma} \right)^{(2,2)} + 1.38x^2 + 0.22 \left(\frac{\pi kT}{A \rho^{*4/9}} \right)^2 \right\} \quad (\text{III. 23})$$

Nous allons préciser numériquement en raisonnant sur le germanium .

On trouve , en unités cgs , $A = 13.42 \times 10^{-23}$, $P = 5 \times 10^{75/2}$, $\alpha = 0.28 \times 10^{-6}$,
 $\alpha \rho^{1/3} = 0.45$, $x = 0.1$, $y = 0.05$ avec $\epsilon = 16$, $m^* = 0.22m_0$, $\rho = 4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
 et $n_a = 0$; la condition de validité de la théorie est $\rho < 3 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$,
 $H \ll 10^5 \text{ Gauss}$ et $T \ll 80^\circ \text{K}$.

Nous introduirons une approximation d'ordre (0,0) dans laquelle on néglige les termes en $(\frac{E_o}{\sigma})$ et $(\frac{\pi kT}{A \rho^{*4/9}})$ devant l'unité. Ainsi, on a $x = (\frac{E_o}{\sigma})^{(0,0)}$ et l'on trouve

$$L_e^{(0,0)} \approx 12.37 \times 10^{-8} \text{ cm} \quad , \quad \sigma^{(0,0)} \approx 15.52 \text{ meV} \quad , \quad E_o^{(0,0)} \approx 1.48 \text{ meV} \quad \text{et} \quad V_o^{(0,0)} \approx 6.26 \text{ meV} .$$

Dans l'approximation d'ordre (2,0) les développements sont limités

au second ordre en (E_0/σ) , tandis que l'on néglige les termes contenant T .

On trouve

$$L_e^{(2,0)} \approx 11.57 \times 10^{-8} \text{ cm} \quad , \quad \sigma^{(2,0)} \approx 14.93 \text{ meV} \quad , \quad E_0^{(2,0)} \approx 1.63 \text{ meV} \text{ et } V_0^{(2,0)} \approx 5.38 \text{ meV} .$$

Introduisant ρ' défini par $\rho' = \left(\rho^{*1/3} - \frac{2n_a}{\alpha 16 P A^{3/2} \rho^{2/3}} \right)^3$, on obtient $x=0$ pour $\rho' \approx 1.90 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$; et x varie à peu près de -0.2 à 0.40 quand ρ' varie de 1.50×10^{17} à $1.90 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Donc l'approximation d'ordre $(0,0)$ est valable pour une large gamme de concentration en impuretés.

(ii) L'hypothèse $n_0 = \rho$ ou $n_0 = \rho - n_a$ n'est pas toujours valable quand la concentration en impuretés est très élevée. Le cas particulier de selenium dans l'arseniure de gallium a été étudié par Vieland et Kudman [89]. Ils ont montré que pour n_0 plus grand qu'à peu près 4×10^{18} électrons par cm^3 , la concentration totale en électrons est proportionnelle à la racine cubique de la concentration en impuretés : on trouve $n_0 = \beta \rho^{1/3} \text{ cm}^{-3}$, où $\beta = 2.16 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Nous analyserons un tel cas et nous le généralisons dans le cas où il y a des accepteurs en posant

$$n_0 = \beta \rho^{1/3} - n_a \quad . \quad (\text{III. 24})$$

Utilisant seulement l'approximation d'ordre $(0,0)$, la condition de validité $|E_0/\sigma| < 1$ avec

$$\left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^{(0,0)} = \frac{\beta}{16 P A^{3/2} (\rho^*)^{1/3}} - \theta \quad ,$$

se réduit pratiquement à

$$\theta^* > \frac{\rho^{1/3} (\text{cm}^{-3})}{A^{9/2} (16 P)^3 (1 + \theta)^3} \quad . \quad (\text{III. 25})$$

Pour n-GaAs, on trouve, en unités cgs, $A = 22.48 \times 10^{-23}$, $P = 10^{75/2}$, avec $\xi = 12.5$, $m^* = 0.072 m_0$; la condition de validité de la théorie est $\rho > 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ pour le cas $n_a = 0$ et la valeur de $\rho = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ correspond à $n_0 \approx 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Dans ce cas, on obtient :

$$L_e \approx 14.88 \times 10^{-8} \text{ cm} \quad , \quad \sigma \approx 108.69 \text{ meV} \quad , \quad E_0 \approx -8.37 \text{ meV} \quad , \quad V_0 \approx -320.40 \text{ meV}$$

C.2 - Effet d'écran global . Tous les résultats précédents reposent sur le calcul du coefficient σ et de la longueur d'écran . Il apparaît alors utile de perfectionner le modèle en ce qui concerne la longueur d'écran en introduisant deux aspects électronique et ionique ; le premier a été étudié dans la section précédente C.1 et nous allons introduire un effet d'écran dû aux ions (donneurs ou accepteurs ionisés) .

En l'absence de toute intervention des électrons , autour de chaque ion , on combine le potentiel coulombien de l'électron $+e/(\epsilon r)$ avec celui qui résulte des ions voisins en arrêtant l'ensemble à une sphère moyenne ou sphère de Wigner-Seitz de rayon r_s dont le volume est $(4\pi r_s^3/3) = 1/\rho^*$; on obtient alors un potentiel "muffin-tin" associé à l'ion . Ce potentiel , pris nul sur la sphère , n'est pas du type hydrogénoïde avec écran , mais il sera commode de le caractériser en gros comme tel en introduisant une longueur d'écran , dite longueur d'écran L_i due aux ions [29, 90] . Il est normal de caractériser les impuretés par ce potentiel modifié ensuite par l'intervention de l'effet d'écran dû aux électrons et d'y rattacher le coefficient

Pour évaluer L_i on utilise une formule semblable à celle (II. 14)

$$\sigma_i^2 = 2\pi \rho^* L_i e^4 \epsilon^{-2} \quad (\text{III. 26})$$

et on note par ailleurs que

$$\sigma_i^2 = \rho^* \int_0^{r_s} v^2(r) 4\pi r^2 dr ,$$

où $v(r)$ est l'énergie potentielle "muffin-tin" associée à l'ion .

En adoptant $v(r) = +e^2/\epsilon (1/r + 1/(2r_s - r) - 2/r_s)$, comme si l'énergie potentielle était celle du problème à une dimension , on trouve numériquement pour L_i la valeur $0.30(\rho^*)^{-1/3}$. Pour tenir compte des approximations faites , il paraît raisonnable d'adopter une valeur un peu plus grande que la précédente : $L_i \approx 0.4 (\rho^*)^{-1/3}$.

L'effet d'écran global est alors obtenu en combinant cet effet avec l'effet d'écran dû aux électrons pour lequel il faut noter que la formule (III. 15) ne peut représenter qu'une approximation grossière . Nous définissons alors une longueur d'écran équivalente globale L par la formule $L = L_e L_i / (L_e + L_i)$. On ne peut admettre l'approximation $L \approx L_e$ que pour des valeurs de ρ qui sont à la limite inférieure de la gamme de validité de l'ensemble du modèle .

A l'autre extrémité de la gamme c'est plutôt $L \simeq L_i$ qu'il faudrait prendre (cf. les exemples numériques qui suivent) . Pour les valeurs intermédiaires , on peut écrire entre L_i et L_e la relation approchée obtenue en éliminant le coefficient σ entre les expressions (II.14) et (III.15) :

$$\rho^* \simeq \frac{K}{L_e} (1 + L_e/L_i) \left\{ 1 - 0.80\left(\frac{E_0}{\sigma}\right) + 0.69\left(\frac{E_0}{\sigma}\right)^2 + 0.11\left(\frac{\pi kT}{\sigma}\right)^2 - 0.08\left(\frac{g^* H}{\sigma}\right)^2 - 0.39\left(\frac{g^* H}{2\sigma}\right)^2 \right\}^8, \quad (\text{III.27})$$

avec $K = (1/2^{3/2} e)^8 (\xi/8\pi P)^4 (2\pi e^4 \xi^{-2})^{-1}$.

Pour simplifier , nous allons discuter le problème seulement pour $H=T=0$.

Du point de vue numérique , raisonnons d'abord sur le germanium.

On trouve , en unités cgs , $K = 27.61 \times 10^{-45}$. Pour $|E_0/\sigma| < 1$, on a pu tracer des courbes correspondant , d'après (III.27) , à

$$\rho^* \simeq \frac{K}{L_e} (1 + L_e/L_i)$$

ρ^* est calculé puis représenté graphiquement en fonction de L_e pour diverses valeurs de L_i à savoir 40 , 25 et 12.5 Å . Ces valeurs , d'après l'expression de L_i ($L_i \simeq 0.40(\rho^*)^{-1/3} \text{ cm}$) , correspondent respectivement pour ρ^* à 10^{18} , 4×10^{18} et $3.27 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. On déduit alors des courbes précédentes les valeurs de L_e à adopter , puis L et σ . On a pu ainsi obtenir le tableau 1 .

Tableau 1 - Valeurs de L et σ en fonction de ρ^* dans le cas où l'on néglige $|E_0/\sigma|$ devant 1 dans l'expression (III.27) .

$\rho^* (\text{ cm}^{-3})$	10^{18}	4×10^{18}	3.27×10^{19}
L_i (Å)	40.00	25.00	12.50
L_e (Å)	14.50	13.00	10.00
L (Å)	10.64	8.50	5.58
σ (mev)	7.35	13.10	30.46
$x = (E_0/\sigma)^{(0,0)}$	- 0.07	0.09	0.55

Tenant compte du facteur correctif $\left\{1 - 0.8(E_o/\sigma) + 0.69(E_o/\sigma)^2\right\}^8$ dans l'expression (III.27), on a alors corrigé les résultats, ce qui conduit au tableau 2.

Tableau 2 - Valeurs précises de L et σ en fonction de ρ^*

$\rho^* (\text{cm}^{-3})$	10^{18}	4×10^{18}	3.27×10^{19}
$L_e (\text{\AA})$	15.25	12.20	8.50
$L (\text{\AA})$	11.04	8.19	5.06
$\sigma (\text{mev})$	7.43	12.87	29.00

Il convient de noter que, pour n-Ge, la dernière valeur de ρ^* considérée est à la limite de validité de la théorie. Les résultats dans le tableau 2, pour l'effet d'écran, sont résumés sur la figure 3.

Pour n-GaAs, nous avons appliqué le même procédé. On trouve, en unités cgs, $K = 3.92 \times 10^{-42}$, et on a pu établir les tableaux 3 et 4.

Tableau 3 - Valeurs de L et σ en fonction de ρ^* dans le cas où l'on néglige $|E_o/\sigma|$ dans l'expression (III.27).

$\rho^* (\text{cm}^{-3})$	8×10^{18}	1.89×10^{19}	6.4×10^{19}	10^{20}
$L_i (\text{\AA})$	20.00	15.00	10.00	8.60
$L_e (\text{\AA})$	21.50	20.10	18.20	16.60
$L (\text{\AA})$	10.36	8.59	6.45	5.66
$\sigma (\text{mev})$	26.25	36.75	58.60	68.62
$x = (E_o/\sigma)^{(0,0)}$	0.28	0.12	-0.03	-0.07

Dans cette gamme de concentration en impuretés, l'approximation où l'on néglige $|E_o/\sigma|$ devant l'unité est bonne. Toutefois, on peut obtenir les valeurs précises de L et le coefficient σ dans le tableau 4.

Tableau 4 - Valeurs précises de L et σ en fonction de ρ^*

ρ (cm ⁻³)	8×10^{18}	1.89×10^{19}	6.4×10^{19}	10^{20}
L_e (Å)	17.00	18.50	18.21	18.20
L (Å)	9.19	8.28	6.42	5.84
σ (mev)	24.75	36.06	58.50	69.75

Les résultats dans ce tableau 4 , pour l'effet d'écran , sont représentés sur la figure 4 .

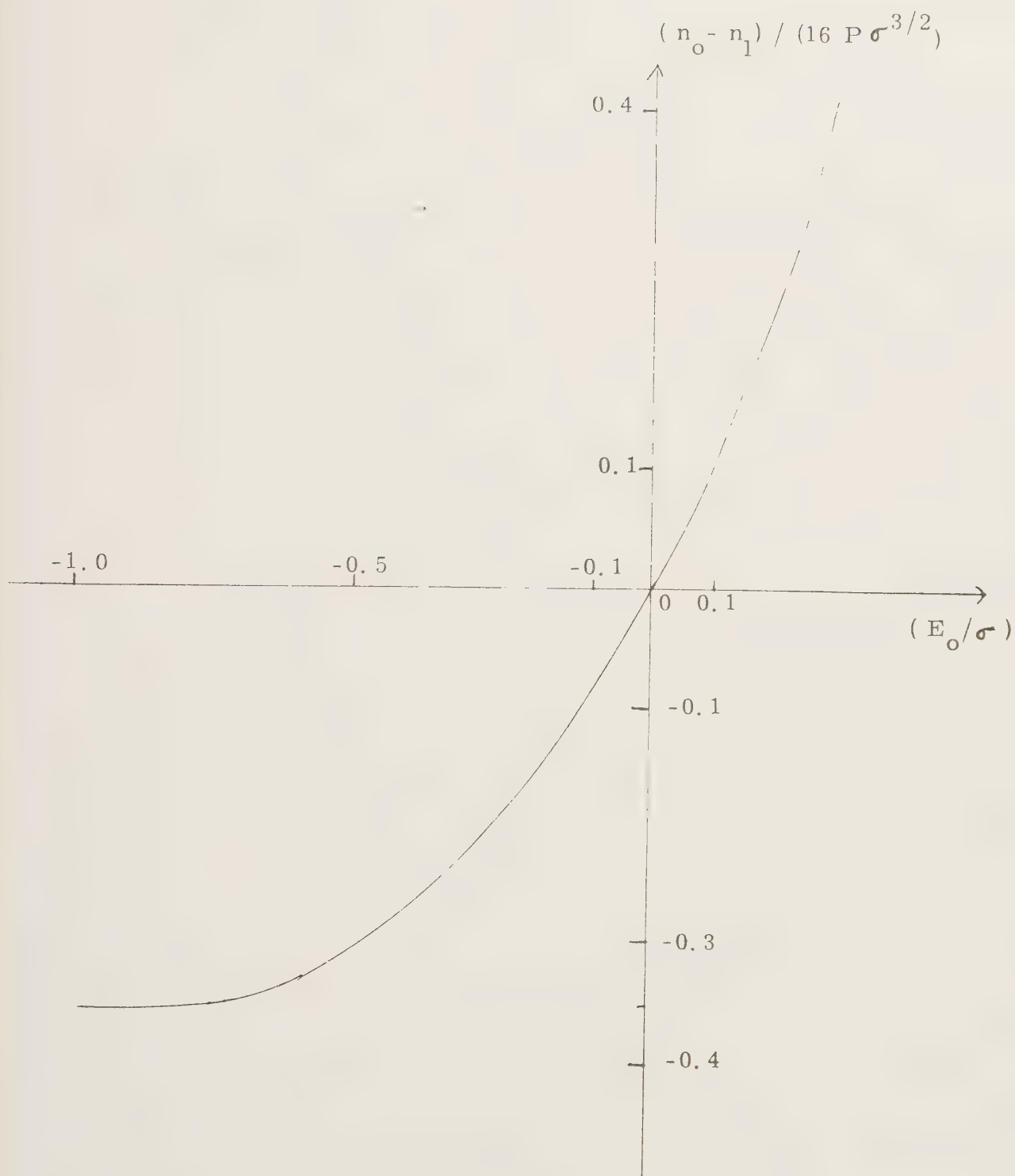


Fig. 2

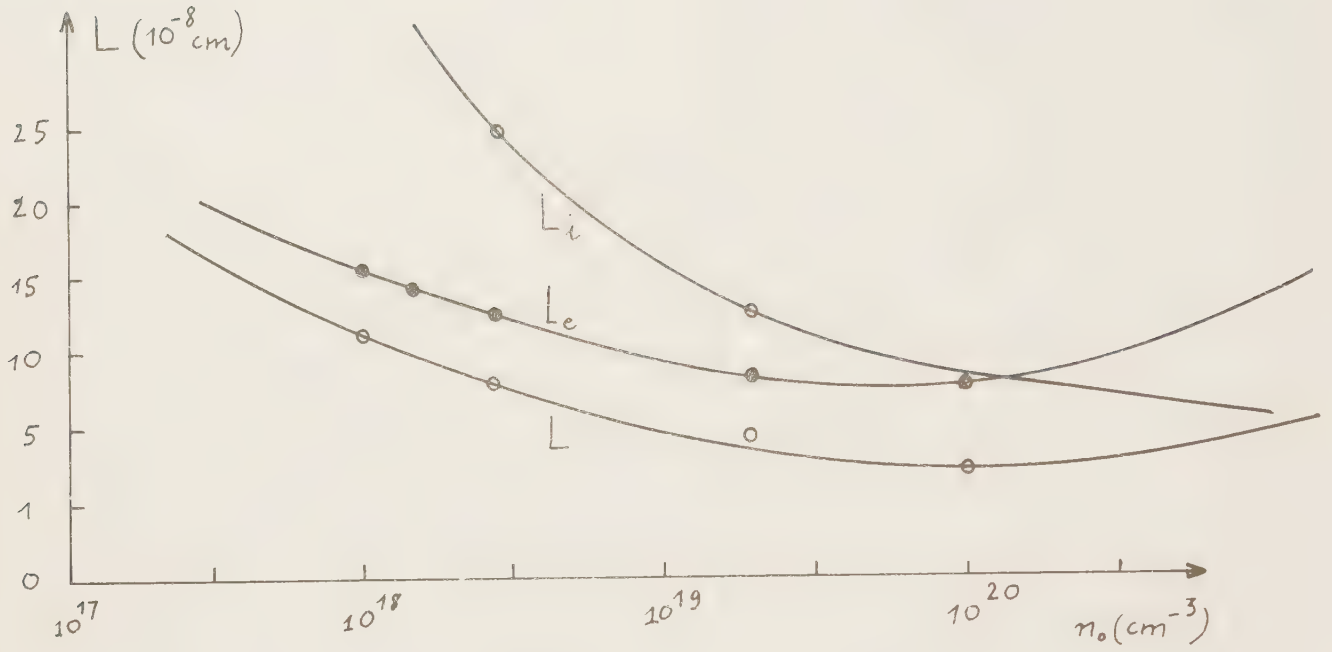


Fig. 3

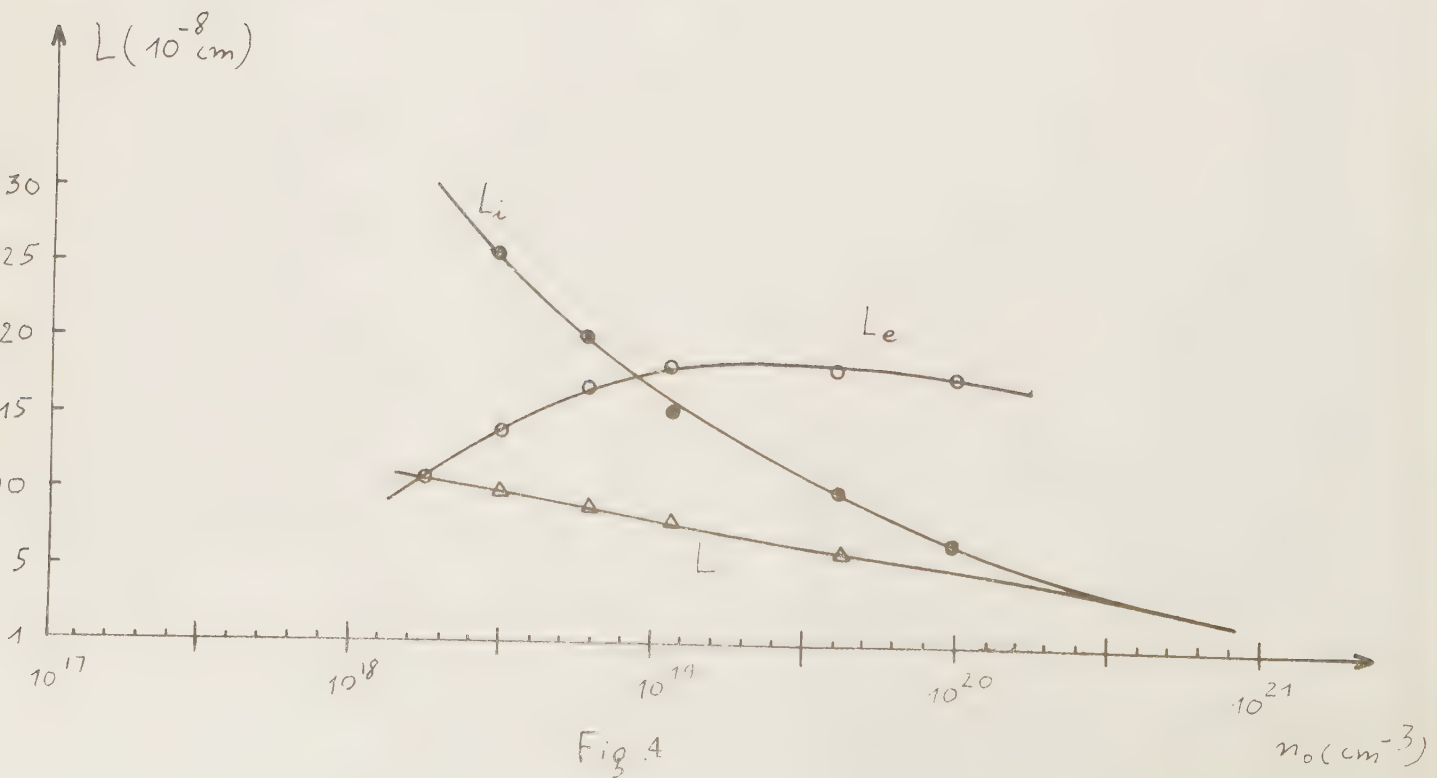


Fig. 4

IV . PROPRIETES THERMODYNAMIQUES

A - Susceptibilité magnétique des électrons .

La susceptibilité magnétique est calculée à partir de la densité d' énergie libre . Sondheimer et Wilson [91] ont montré que , pour des électrons indépendants , l'énergie libre du mouvement orbital par unité de volume est obtenue à partir de la transformée de Laplace de la fonction de partition classique et , pour l'influence des spins électroniques , l'énergie libre par unité de volume est calculée jusqu'au terme en H^2 . L'énergie libre totale F par unité de volume est donnée par [20]

$$F - n_0 E_F = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) \left\{ \int_{-\infty}^E E' N(E', H) dE' + \left(\frac{g^*}{2} \mu_B^* H \right)^2 N^{(0)}(E) \right\} . \quad (\text{IV.1})$$

où n_0 est la densité des électrons , E_F l'énergie de Fermi définie à partir de l'expression (III.4) . Dans l'équation (IV.1) , le premier terme du second membre représente l'énergie libre du mouvement orbital $\mathcal{F}_{\text{orb.}}$ et le second terme l'énergie libre de spin $\mathcal{F}_s$. En négligeant l'énergie d'interaction entre spins et orbites , on a

$$F - n_0 E_F = \mathcal{F}_{\text{orb.}} + \mathcal{F}_s ,$$

où

$$\mathcal{F}_{\text{orb.}} = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) \mathcal{F}_{\text{orb.}}^*(E) dE , \quad (\text{IV.2})$$

avec

$$\mathcal{F}_{\text{orb.}}^*(E) = \int_{-\infty}^E E' N(E', H) dE' , \quad (\text{IV.3})$$

et

$$\mathcal{F}_s = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right) \mathcal{F}_s^*(E) dE . \quad (\text{IV.4})$$

avec

$$\mathcal{F}_s^*(E) = \left(\frac{g^*}{2} \mu_B^* H \right)^2 N^{(0)}(E) . \quad (\text{IV. 5})$$

Utilisant les équations (II.35) et (IV.3) , et remarquant que

$$\int_0^E \left(\frac{E'}{\sigma} \right)^n e^{- (E'/\sigma)^2} d\left(\frac{E'}{\sigma} \right) = \frac{1}{2} \int_0^{(E/\sigma)^2} x^{(n-1)/2} e^{-x} dx = -\frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{n+1}{2} ; \left(\frac{E}{\sigma} \right)^2 \right)$$

avec $x = (E'/\sigma)^2$, nous obtenons

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\text{orb}}^*(E) &= \frac{(2 m^*)^{3/2} (\mu_B^* H)^2 \sigma}{12 \pi \hbar^3 \Gamma(3/4) \Gamma(1/4)} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \\ &\times \left\{ - \frac{[\Gamma(1/2)]^2 \Gamma(m+1/4) \Gamma(m+3/2; (E/\sigma)^2)}{\Gamma(m+1/2)} - \right. \\ &- \frac{2\sqrt{\pi} \Gamma(3/2) \Gamma(m+3/4)}{\Gamma(m+3/2)} \Gamma\left(m+2; \left(\frac{E}{\sigma}\right)^2\right) \\ &- \frac{m [\Gamma(1/2)]^2 \Gamma(m+1/4) \Gamma(m+1/2; (E/\sigma)^2)}{\Gamma(m+1/2)} \\ &\left. - \frac{\sqrt{\pi} \Gamma(3/2) \Gamma(m+3/4) (2m+1)}{\Gamma(m+3/2)} \Gamma\left(m+1; \left(\frac{E}{\sigma}\right)^2\right) \right\} + \int_0^E E' N^{(0)}(E') dE' , \quad (3.7) \end{aligned}$$

(IV. 7)

où le dernier terme indépendant du champ magnétique ne joue aucun rôle important dans le calcul de la susceptibilité magnétique , mais est indispensable pour le calcul de la chaleur spécifique des électrons (cf. la section B) ; on applique ici le même procédé , pour calculer numériquement cette intégrale , que pour la détermination de la contribution n_1 des énergies négatives à la densité totale n_0 des électrons :

$$\int_{-\infty}^E E' N^{(0)}(E') dE' \approx 4P \sigma^{5/2} \left\{ \left(\frac{E}{\sigma} \right)^2 + 1.06 \left(\frac{E}{\sigma} \right)^3 + 0.27 \left(\frac{E}{\sigma} \right)^4 \right\} - 0.21_4 P \sigma^{5/2}$$

pour $\left| \frac{E}{\sigma} \right| < 1$. (IV. 8)

Utilisant le développement de la fonction Gamma incomplète et considérant le cas des basses températures , on obtient

$$\begin{aligned}
T_{\text{orb.}} = & \frac{(2m^*)^{3/2} (\mu_B^*)^2 H^2}{12 \pi \hbar^3 \Gamma(3/4) \Gamma(1/4)} \sqrt{\sigma} \\
& \times \left\{ \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(\frac{[\Gamma(1/2)]^2 \Gamma(m+1/4) \{\Gamma(m+3/2) - m \Gamma(m+1/2)\}}{\Gamma(m+1/2)} + \right. \right. \\
& \left. \left. \sqrt{\pi} \Gamma(3/2) \Gamma(m+3/4) \{2 \Gamma(m+2) - (2m+1) \Gamma(m+1)\}} \right) \Gamma(m+3/2) \right\} - \\
& \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l \sqrt{\pi} \Gamma(3/2) \Gamma(m+3/4)}{m! l! \sigma^{2m+2l+2} \Gamma(m+3/2)} \times \\
& \times \left(\sum_{\mu=0,2,\dots}^{p=2m+2l+4} C_p^{\mu}(kT)^{\mu} E_F^{(p-\mu)} (2^{\mu} - 2) \pi^{\mu} \frac{2}{\sigma^2 (m+l+2)} B_{\mu/2} - \right. \\
& \left. - \sum_{\mu'=0,2,\dots}^{p'=2m+2l+2} C_{p'}^{\mu'}(kT)^{\mu'} E_F^{(p'-\mu')} (2^{\mu'} - 2) \pi^{\mu'} \frac{2m+1}{(m+l+1)} B_{\mu'/2} \right) - \\
& - \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l [\Gamma(1/2)]^2 \Gamma(m+1/4)}{m! l! \sigma^{2m+2l+1} \Gamma(m+1/2)} \times \\
& \times \left(\sum_{\mu=0,2,\dots}^{p=2m+2l+3} C_p^{\mu}(kT)^{\mu} E_F^{(p-\mu)} (2^{\mu} - 2) \frac{2 \pi^{\mu}}{\sigma^2 (2m+2l+3)} B_{\mu/2} - \right. \\
& \left. - \sum_{\mu'=0,\dots}^{p'=2m+2l+1} C_{p'}^{\mu'}(kT)^{\mu'} E_F^{(p'-\mu')} (2^{\mu'} - 2) \pi^{\mu'} \frac{2m}{(2m+2l+1)} B_{\mu'/2} \right) \Big\} + \\
& - f(T),
\end{aligned}
\tag{IV. 9}$$

où $f(T)$ est une fonction de la température T , soit

$$f(T) \approx -8P \sigma^{5/2} \left\{ \left(\frac{E_F}{\sigma} \right)^2 + 1.06 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right)^3 + 0.27 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right)^4 \right\} + 0.21 \times 8P \sigma^{5/2},$$

pour $\left| \frac{E_F}{\sigma} \right| < 1$.

D'autre part, on obtient, pour la contribution de spin à l'énergie libre totale,

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_s = & \frac{(2m^*)^{3/2} \sqrt{\sigma}}{4 \pi \hbar^3 \Gamma(3/4) \Gamma(1/4)} \left(\frac{g^* \mu_B^* H}{2} \right)^2 \times \\
& \times \left\{ \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(\left[\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \right]^2 \Gamma\left(m + \frac{1}{4}\right) - \frac{2 \sqrt{\pi} \Gamma(3/2) \Gamma(m+3/4) \Gamma(m+1)}{\Gamma(m+3/2)} \right) + \right. \\
& + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^l 2 \sqrt{\pi} \Gamma(3/2) \Gamma(m+3/4)}{m! l! \sigma^{2m+2l+2} (m+l+1) \Gamma(m+3/2)} \times \\
& \times \sum_{\mu=0,2,\dots}^{p=2m+2l+2} C_p^{\mu}(kT)^{\mu} E_F^{(p-\mu)} (2^{\mu} - 2) \pi^{\mu} B_{\mu/2} + \\
& + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^l 2 [\Gamma(1/2)]^2 \Gamma(m+1/4)}{m! l! \sigma^{2m+2l+1} (2m+2l+1) \Gamma(m+1/2)} \times \\
& \times \sum_{\mu'=0,\dots}^{p'=2m+2l+1} C_{p'}^{\mu'}(kT)^{\mu'} E_F^{(p'-\mu')} (2^{\mu'} - 2) \pi^{\mu'} B_{\mu'/2} \Big\}.
\end{aligned}$$

(IV. 10)

La susceptibilité magnétique par unité de volume est donnée par

$$\chi = -\frac{1}{H} \left(\frac{dF}{dH} \right) \Big|_{H=0} = -\frac{1}{H} \left\{ \left(\frac{\partial F}{\partial H} \right)_{E_F} + \left(\frac{\partial F}{\partial E_F} \right)_H \left(\frac{dE_F}{dH} \right) \right\} \Big|_{H=0} = -\frac{1}{H} \left(\frac{\partial F}{\partial H} \right)_{E_F} \Big|_{H=0}, \quad (\text{IV.11})$$

où le deuxième terme de la seconde expression de χ s'annule, compte tenu de la condition $(\partial F / \partial E_F) = 0$. Les dérivées partielles par rapport à H sont calculées pour E_F et n_0 constantes.

Comme l'énergie libre totale F , la susceptibilité magnétique totale des électrons par unité de volume peut s'écrire

$$\chi = \chi_{\text{orb.}} + \chi_s, \quad (\text{IV.12})$$

où

$$\chi_{\text{orb.}} = -8.3 a / \sigma \left\{ 1 + 0.26 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^2 - 0.03 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^3 + \dots + 0.08 \left(\frac{\pi kT}{\sigma} \right)^2 - 0.57 \left(\frac{\pi kT}{\sigma} \right)^2 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) - 0.4 \left(\frac{\pi kT}{\sigma} \right) \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^2 - 0.01 \left(\frac{\pi kT}{\sigma} \right)^4 \dots \right\}, \quad (\text{IV.13})$$

et

$$\chi_s = 8 a' / \sigma \left\{ 1 + 1.6 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + 0.54 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^2 - 0.27 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^3 + \dots - 0.24 \left(\frac{\pi kT}{\sigma} \right)^2 - 0.17 \left(\frac{\pi kT}{\sigma} \right)^2 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + 0.16 \left(\frac{\pi kT}{\sigma} \right)^2 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^2 - 0.01 \left(\frac{\pi kT}{\sigma} \right)^4 \dots \right\}. \quad (\text{IV.14})$$

avec $a = 4(2 m^*)^{3/2} (\mu_B^*)^2 / (12 \pi \hbar^3 \Gamma(3/4) \Gamma(1/4))$ et $a' = 3 a (g^*/2)^2$, où le facteur gyromagnétique effectif g^* défini ici, est en relation avec celui ordinaire par $g^* = \left(\frac{m^*}{m_0} \right) g$ avec $g=2$ pour l'état s de l'électron; les facteurs 8.3 et 8 dans ces expressions sont les valeurs des termes contenant seulement la somme sur m dans les expressions (IV.9) et (IV.10), respectivement.

B - Chaleur spécifique des électrons.

La chaleur spécifique des électrons est donnée par

et

$$C_{V,0} = T \left(\frac{\partial S^{(0)}}{\partial T} \right)_{H=0} \quad (\text{IV.15})$$

$$C_{V,H} = T \left(\frac{\partial S^{(2)}}{\partial T} \right)_H, \quad (\text{IV.16})$$

où l'entropie des électrons est définie par

avec
$$-S = \frac{dF}{dT} = \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_\sigma + \left(\frac{\partial F}{\partial \sigma} \right)_T \left(\frac{\partial \sigma}{\partial T} \right) = -S^{(0)}(\varrho, T) - S^{(2)}(\varrho, T)$$

$$-S^{(0)}(\varrho, T) = \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right)_\sigma + \left(\frac{\partial f}{\partial \sigma} \right)_T \left(\frac{d\sigma}{dT} \right)$$

$$-S^{(2)}(\varrho, T) = H^2 \left\{ \left(\frac{\partial g}{\partial T} \right)_\sigma + \left(\frac{\partial g}{\partial \sigma} \right)_T \left(\frac{d\sigma}{dT} \right) \right\}.$$

Dans cette expression de S , l'énergie libre totale F par unité de volume, dans un faible champ magnétique H à basse température T , est obtenue à partir des expressions (IV.9), (IV.10), (III.4) et (III.13) :

$$\begin{aligned} F = n_o E_F + \mathcal{F}_{\text{orb}} + \mathcal{F}_s &\equiv f^1(T) + H^2 g(T) \\ &\approx 5.60 P E_o^2 \rho^{8/9} \left\{ 1 + 0.55 \left(\frac{E_o}{\sigma} \right) + 0.06 \left(\frac{E_o}{\sigma} \right)^2 - 0.49 \left(\frac{\pi k T}{\sigma} \right)^2 - \right. \\ &\quad \left. - 0.74 \frac{(\pi k T)^2}{E_o \sigma} \right\} + 1.68 P \sigma^{5/2} + \\ &+ H^2 \left\{ 5.53 P (\chi_B^*)^2 A^{1/2} \rho^{2/9} \left[1 - 0.17 \left(\frac{E_o}{\sigma} \right) + 0.39 \left(\frac{E_o}{\sigma} \right)^2 + 0.10 \left(\frac{\pi k T}{\sigma} \right)^2 \right] - \right. \\ &\quad \left. - 16 P \left(\frac{g_B^* \chi_B^*}{2} \right)^2 A^{1/2} \rho^{2/9} \left[1 + 1.43 \left(\frac{E_o}{\sigma} \right) + 0.40 \left(\frac{E_o}{\sigma} \right)^2 - 0.22 \left(\frac{\pi k T}{\sigma} \right)^2 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{IV.17})$$

Donc ,

$$S^{(0)}(\rho, T) \approx 5.60 P (\pi k)^2 A^{1/2} \rho^{2/9} \left\{ rT + (s/3)T^3 \right\}, \quad (\text{IV.18})$$

$$S^{(2)}(\rho, T, H) = -tH^2 T, \quad (\text{IV.19})$$

où

$$r = 1.40Q_1 + 0.98xQ_2 + 0.05x^2Q_3 + 0.01x^3Q_4 ,$$

$$s = - \frac{0.19(\pi k)^2 Q_4}{A^2 \rho^{8/9}} - \frac{0.15(\pi k)^2 Q_3}{E_o A \rho^{4/9}} ,$$

$$t = \frac{P \mu_b^* (\pi k)^2}{A^{3/2} \rho^{2/3}} \left\{ 1.10 + 7.07(g^*/2)^2 \right\} ,$$

$$Q_1 = 1 + 0.36\left(\frac{E_o}{\sigma}\right) - 0.11\left(\frac{E_o}{\sigma}\right)^2 - 0.05\left(\frac{\pi k T}{\sigma}\right)^2 ,$$

$$Q_2 = 1 + 0.70\left(\frac{E_o}{\sigma}\right) - 0.08\left(\frac{E_o}{\sigma}\right)^2 - 0.10\left(\frac{\pi k T}{\sigma}\right)^2 ,$$

$$Q_3 = 1 + 1.40\left(\frac{E_o}{\sigma}\right) + 0.32\left(\frac{E_o}{\sigma}\right)^2 + 0.20\left(\frac{\pi k T}{\sigma}\right)^2$$

et

$$Q_4 = 1 + 1.75\left(\frac{E_o}{\sigma}\right) + 0.70\left(\frac{E_o}{\sigma}\right)^2 + 0.25\left(\frac{\pi k T}{\sigma}\right)^2 .$$

C - Discussion .

Nous allons discuter les propriétés thermodynamiques pour deux cas typiques de semi-conducteur comme dans le chapitre III .

$$C.1 - \frac{n_o}{\rho} = \frac{n_a}{\rho}$$

(i) Semi-conducteur non compensé . Nous considérons d'abord l'effet d'écran dû seulement aux électrons . On obtient dans ce cas

$$\chi_{orb} \simeq - a_1 \rho^{2/9} \left\{ 1 - 0.17 x + 0.17 x^2 + 0.10 \left(\frac{\pi k T}{A \rho^{4/9}} \right)^2 \right\} , \quad (IV.20)$$

$$\chi_s \simeq a'_1 \rho^{2/9} \left\{ 1 + 1.43 x + 0.16 x^2 - 0.22 \left(\frac{\pi k T}{A \rho^{4/9}} \right)^2 \right\} , \quad (IV.21)$$

$$C_{V,o} \simeq \gamma_1 T + \gamma_2 T^3 , \quad (IV.22)$$

$$\text{et } C_{V,H} \simeq - t H^2 T , \quad (IV.23)$$

où

$$a_1 = 8.3 a A^{1/2} = 11.06 P (\mu_b^*)^2 A^{1/2} = - \frac{1.20 \times 10^{-11}}{\xi^{1/3} (m^*/m_o)^{2/3}} ,$$

$$a_1' = 8a'A^{1/2} = 32P\left(\frac{g^*\gamma_B^*}{2}\right)^2 A^{1/2} = \frac{5.42 \times 10^{-11}}{\xi^{1/3}} (m^*/m_o)^{4/3},$$

$$\gamma_1 = 5.60P(\pi k)^2 A^{1/2} r \rho^{2/9} = 4.70 \times 10^{-9} r \frac{\rho^{2/9}}{\xi^{1/3}} (m^*/m_o)^{4/3},$$

$$\gamma_2 = 5.60P(\pi k)^2 A^{1/2} s \rho^{2/9}.$$

On peut conclure que , pour $|E_o/\sigma| \ll 1$, la susceptibilité magnétique et la chaleur spécifique des électrons sont proportionnelles à la puissance $2/9$ de la densité des impuretés (ou de celle des électrons) pour une température suffisamment basse et dans un champ magnétique très faible . Cette conclusion n'est pas très différente de celle de la théorie des gaz d'électrons fortement dégénérés , où intervient la puissance $3/9$ de la densité des électrons [92, 2, 3, 4] . D'autre part, quand la température augmente $|\chi_{orb}|$ croît , tandis que χ_s et $C_{V,o}$ décroissent légèrement , pour un dopage donné . On trouve dans cette approximation ,

$$\chi_{orb} \approx - \frac{1.20 \times 10^{-11}}{\xi^{1/3} (m^*/m_o)^{2/3}} \rho^{2/9}, \quad (IV. 24)$$

$$\chi_s \approx \frac{5.42 \times 10^{-11}}{\xi^{1/3}} (m^*/m_o)^{4/3} \rho^{2/9}, \quad (IV. 25)$$

et

$$C_{V,o} \approx \frac{6.58 \times 10^{-9}}{\xi^{1/3}} (m^*/m_o)^{4/3} \rho^{2/9} T. \quad (IV. 26)$$

Par exemple , pour n-Ge non compensé , avec $\rho = 4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, on obtient $\gamma_1 = 0.524 \times 10^{-5} (\text{J/mole deg}^2)$, $\gamma_2 = -10^{-10} (\text{J/mole deg}^4)$ et $t = -0.8 \times 10^{18} \text{ H}^2 (\text{J/mole deg}^2)$.

La chaleur spécifique ainsi calculée est la chaleur spécifique électronique , mais la chaleur spécifique totale est essentiellement due aux électrons , car le terme en T^3 dans la formule (IV. 22) et l'influence du réseau cristallin deviennent négligeables pour les basses températures . D'autre part , dans un faible champ magnétique , la contribution $C_{V,H}$ dans l'expression (IV. 23) est très faible par rapport à la contribution $\gamma_1 T$.

Les propriétés thermodynamiques sont données en fonction de ρ pour le germanium non compensé , dans les tableaux 5 et 6 .

Tableau 5 - Susceptibilité magnétique des électrons en fonction de ρ , d'après les formules (IV.20) et (IV.21) pour $T = 0$.

ρ (cm ⁻³)	1×10^{18}	1.9×10^{18}	4×10^{18}	3.27×10^{19}
$\chi_{\text{orb}} (10^{-7} \text{ cgs})$	-1.31	-1.50	-1.74	-2.549
$\chi_s (10^{-7} \text{ cgs})$	0.18	0.23	0.30	0.75
$\chi_e (10^{-7} \text{ cgs})$	-1.13	-1.27	-1.44	-1.80
$x = (E_o/\sigma)^{(0,0)}$	-0.07	0	0.10	0.55

Dans ce tableau , pour une concentration en impuretés assez élevée avec $\rho \in [4 \times 10^{18}, 3.27 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}]$ où les approximations sont valables , le rapport $\chi_{e, \text{calc.}} / \chi_{e, \text{exp.}}$ est à peu près égal à 2 , en adoptant les valeurs expérimentales données par Bowers [1] .

Tableau 6 - Coefficient de la chaleur spécifique des électrons en fonction de ρ , d'après de l'expression (IV.22) , pour $T=0$.

ρ (cm ⁻³)	1×10^{18}	1.9×10^{18}	4×10^{18}	3.27×10^{19}
r	1.293	1.400	1.567	2.427
γ_1 (J/mole deg ²)	0.32×10^{-5}	0.40×10^{-5}	0.52×10^{-5}	1.31×10^{-5}

Pour $\rho \approx 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, l'expérience [2, 3, 4] donne $\gamma_{1, \text{exp.}} \approx 0.9 \times 10^{-5} \text{ (J/mole deg}^2\text{)}$ tandis que notre théorie donne $\gamma_1 \approx 0.32 \times 10^{-5}$, mais il faut noter que l'on sort du domaine de validité de la théorie . D'autre part , pour une concentration en impuretés assez élevée , la théorie donne $\gamma_1 \approx 0.9 \times 10^{-5} \text{ (J/mole deg}^2\text{)}$.

Un certain désaccord entre la théorie et l'expérience pour les propriétés thermodynamiques s'explique par le fait que le modèle ne tient compte de diverses influences , par exemple effets de corrélation électron-électron, effet dû aux ions .

Nous nous proposons d'étudier maintenant ces propriétés thermo-

-dynamiques en tenant compte non seulement de l'effet d'écran dû aux électrons mais aussi de celui qui est dû aux ions (cf. la discussion du chapitre précédent) et nous considérons l'effet d'écran global donné par l'expression $1/L = 1/L_i + 1/L_e$. Il intervient un coefficient modifié $\sigma_{\text{mod.}}$ et cela entraîne une modification des valeurs de χ_e et $C_{V,o}$. L'indice mod. caractérisera les résultats ainsi obtenus. Le tableau 7 donne les résultats.

Tableau 7 - Susceptibilité magnétique et chaleur spécifique avec σ modifié, en fonction de ρ .

$\rho \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	1×10^{18}	1.9×10^{18}	4×10^{18}	3.27×10^{19}
$\chi_{\text{orb, mod.}} (10^{-7} \text{ cgs})$	-1.22	-1.39	-1.60	-2.41
$\chi_{\text{s, mod.}} (10^{-7} \text{ cgs})$	0.16	0.21	0.278	0.537
$\chi_{\text{e, mod.}} (10^{-7} \text{ cgs})$	-1.06	-1.18	-1.32	-1.87
$\gamma_{\text{l, mod.}} (10^{-5} \text{ J/mole deg}^2)$	0.28	0.37	0.48	1.17
$\sigma_{\text{mod.}} (10^{-14} \text{ erg.})$	1.18	1.55	2.06	4.64

On constate que χ_e et γ_l sont légèrement diminués, en valeur absolue, quand on introduit l'effet d'écran global.

(ii) Semi-conducteur partiellement compensé. En présence d'accepteurs (par exemple $n_a = \rho/2$, ce qui correspond à un effet de compensation partielle assez importante), la susceptibilité magnétique et la chaleur spécifique sont données par les tableaux 8 et 9.

Tableau 8 - Susceptibilité magnétique et chaleur spécifique dans le cas où $L = L_e$ avec $\rho^* = 1.5 \rho$.

$\rho \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	1×10^{18}	1.9×10^{18}	4×10^{18}	3.27×10^{19}
x	-0.22	-0.19	-0.135	-0.073
$A(\rho)^{4/9} (10^{-14} \text{ erg})$	1.63	2.15	3.02	7.65
$E_o (10^{-14} \text{ erg})$	-0.357	-0.404	-0.41	-0.56
$\chi_e (10^{-7} \text{ cgs})$	-1.35	-1.52	-1.76	-2.97
$\gamma_l (10^{-5} \text{ J/mole deg}^2)$	0.30	0.36	0.45	0.77

Tableau 9 - Susceptibilité magnétique et chaleur spécifique dans le cas où $1/L = 1/L_i + 1/L_e$ avec $\rho^* = 1.5 \rho$.

ρ (cm ⁻³)	1×10^{18}	1.9×10^{18}	4×10^{18}	3.27×10^{19}
$\sigma_{\text{mod.}}$ (10 ⁻¹⁴ erg)	1.34	1.83	2.40	5.65
$\chi_{e, \text{mod.}}$ (10 ⁻⁷ erg)	-1.21	-1.40	-1.56	-2.34
$\gamma_{l, \text{mod.}}$ (10 ⁵ /mole deg ²)	0.27	0.33	0.40	0.66

On remarque que, dans l'intervalle des concentrations en impuretés considéré, avec un facteur de compensation $K = \frac{n_a}{\rho} = 1/2$, la théorie est satisfaisante ; x est petit en valeur absolue.

Ces résultats de χ_e et γ_l pour n-Ge sont résumés respectivement sur les figures 5 et 6.

$$C.2 - \frac{n_o}{\rho} = \beta \rho^{1/3} - n_a.$$

Nous considérons comme le chapitre précédent l'exemple de l'arséniure de gallium de type n non compensé (cf. Tableaux 10 à 12).

(i) Cas où $L = L_e$ (Tableaux 10 et 11).

Tableau 10 - Susceptibilité magnétique des électrons en fonction de ρ , d'après les formules (IV.20) et (IV.21) pour $T = 0^\circ\text{K}$.

ρ (cm ⁻³)	8×10^{18}	1.89×10^{19}	6.4×10^{19}	10^{20}
x	0.280	0.125	-0.030	-0.077
χ_{orb} (10 ⁻⁷ cgs)	-6.99	-8.45	-11.09	-12.24
χ_s (10 ⁻⁷ cgs)	1.08	1.29	1.66	1.84
χ_e (10 ⁻⁷ cgs)	-5.91	-7.16	-9.43	-10.40
$A \rho^{4/9}$ (10 ⁻¹⁴ erg)	5.66	8.25	14.27	17.42

Tableau 11 - Coefficient de la chaleur spécifique des électrons, en fonction de ρ , d'après l'expression (IV.22) pour $T = 0^\circ\text{K}$.

ρ (cm ⁻³)	8×10^{18}	1.89×10^{19}	6.4×10^{19}	10^{20}
r	1.878	1.596	1.350	1.290
$\gamma_1 (10^{-5} \text{ J/mole deg}^2)$	0.18	0.19	0.21	0.22

On remarque que, $x = |(E_0/\sigma)^{(0,0)}| \ll 1$ dans l'intervalle de densités d'impuretés considéré, l'approximation dans laquelle on néglige $|E_0/\sigma|$ devant 1 dans tous les calculs, est satisfaisante. Le coefficient γ_1 est donc à peu près égal à 0.20×10^{-5} (J/mole deg²), pour un dopage ρ variant dans cette gamme de concentration en impuretés considérée.

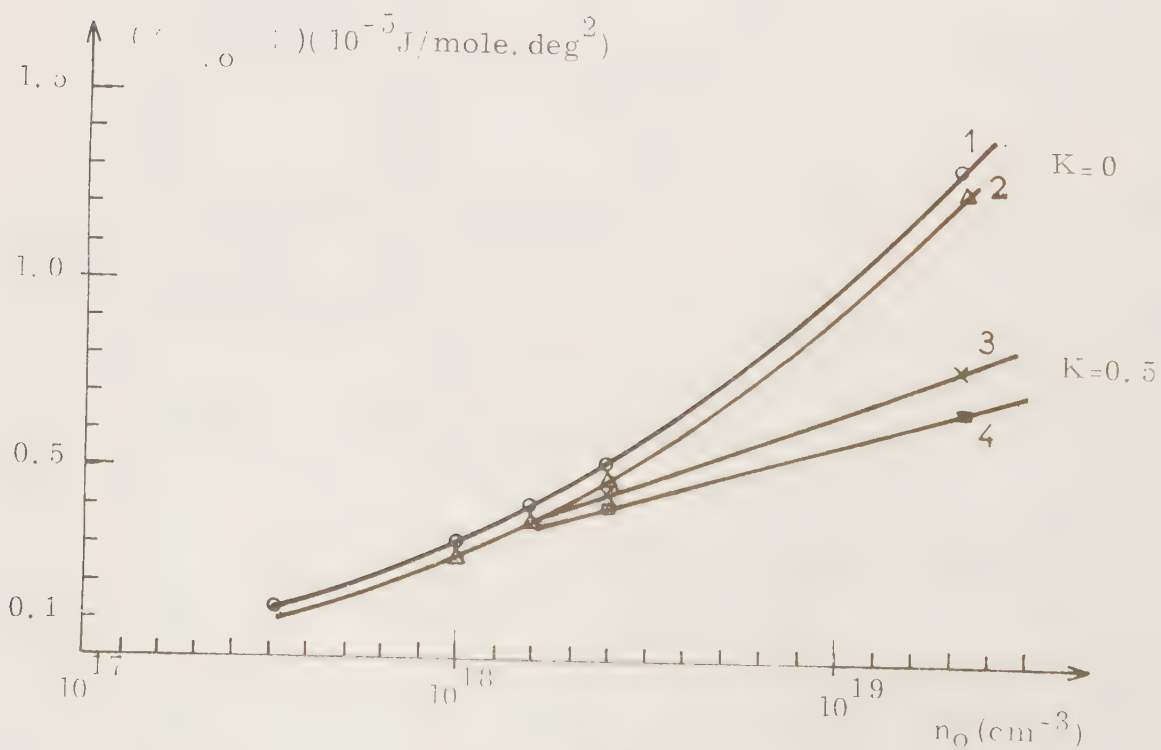
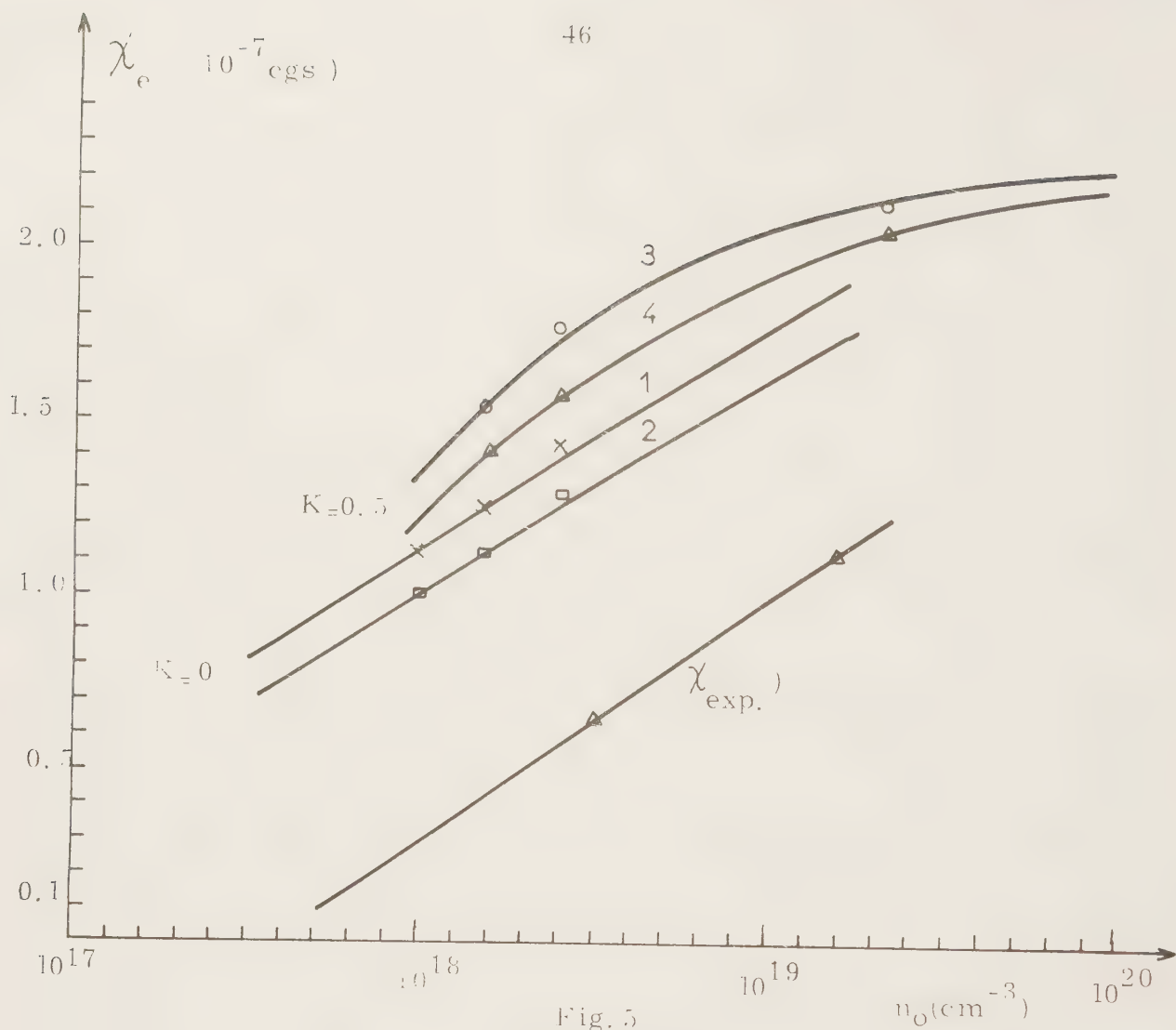
(ii) Cas où $1/L = 1/L_i + 1/L_e$.

Tableau 12 - Susceptibilité magnétique et chaleur spécifique des électrons avec $\sigma_{\text{mod.}}$.

ρ (cm ⁻³)	8×10^{18}	1.89×10^{19}	6.4×10^{19}	10^{20}
$\chi (10^{-7} \text{ cgs})$ orb, mod.	-5.84	-7.05	-8.98	-9.81
$\chi (10^{-7} \text{ cgs})$ s, mod.	0.87	1.06	1.35	1.47
$\chi (10^{-7} \text{ cgs})$ e, mod.	-4.97	-5.99	-7.63	-8.34
$\gamma (10^{-5} \text{ J/mole deg}^2)$ l, mod.	0.16	0.163	0.17	0.18
$\sigma (10^{-14} \text{ erg})$ mod.	3.96	3.77	9.36	11.16

Les résultats sont nettement différents de ceux qui ont été trouvés dans l'approximation $L = L_e$. Cela prouve que l'intervention de l'effet d'écran dû aux ions est nécessaire pour le semi-conducteur très dopés car plus le dopage augmente plus L_i est faible et $L_i < L_e$.

Ces résultats sont résumés sur les figures 7 et 8.



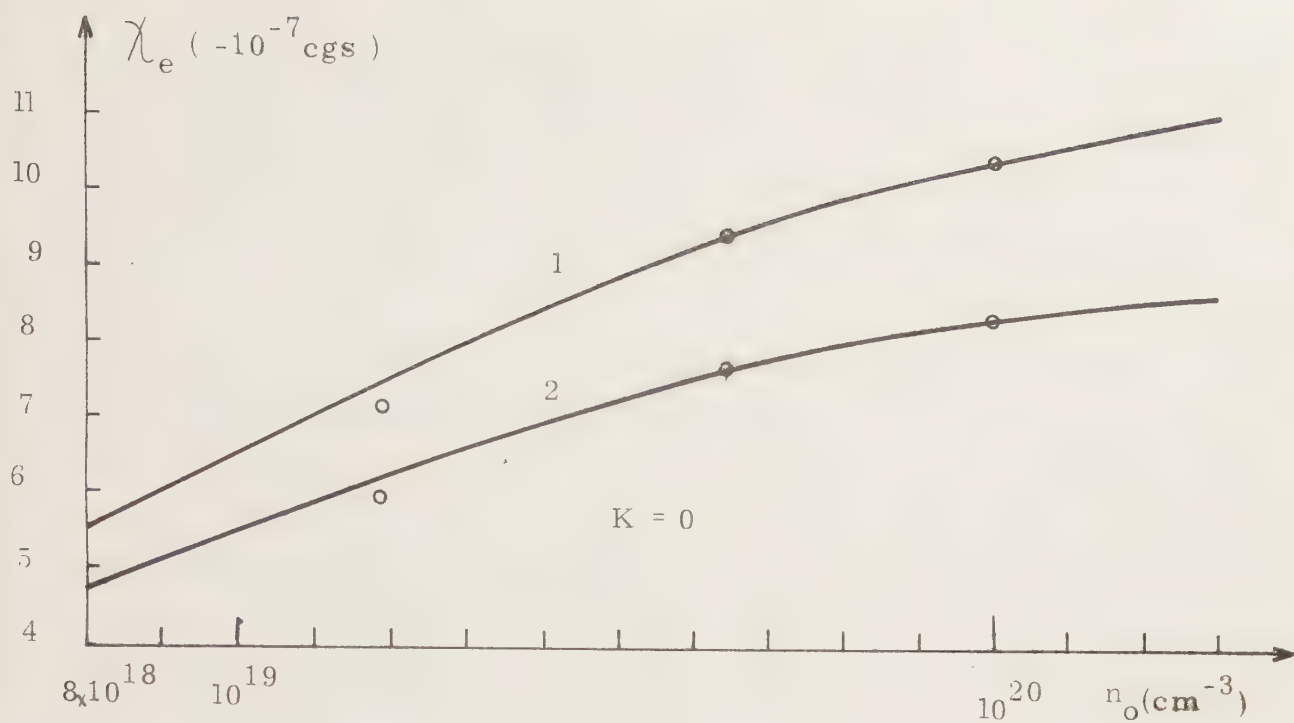


Fig. 7

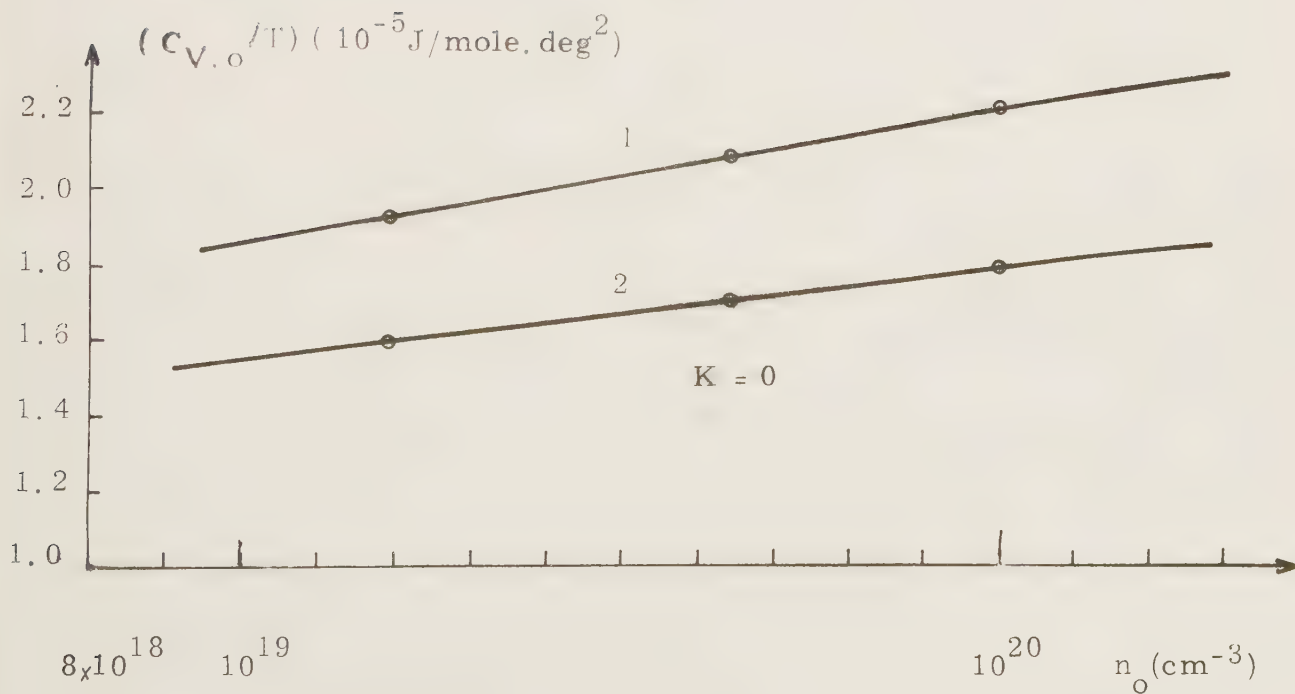


Fig. 8

V . Conductivité et effet Hall

A - Conductivité .

Dans l'approximation à un électron , l'équation de Kubo (1956) [22] constitue une formule exacte de la conductivité électrique . Edwards (1958) [76] a montré que cette formule peut être exprimée en termes de fonction de Green à une particule ; en outre , pour une faible densité des centres diffusants , il a montré que cette formule conduit , sous certaines conditions , aux mêmes résultats que l'équation de Boltzmann . La méthode a été généralisée par Langer (1960) [93] au problème à N corps et , plus tard , développée par Neal (1968) [94] pour le cas monoélectronique .

Nous allons d'abord généraliser la formule de la conductivité à fréquence et température nulle trouvée par Jones (1970) [25] à partir de la formule de Langer et de la méthode des fonctions de Green au cas d'une température finie T .

On part de la fonction de Green à une particule définie par

$$G^{\epsilon}(\vec{p}, \vec{p}', E) = \langle \vec{p} | (E - H + i \delta \epsilon)^{-1} | \vec{p}' \rangle , \quad (\delta \rightarrow +0) ,$$

où ϵ prend les valeurs +1 ou -1 , $\vec{p}$ étant la quantité de mouvement ($\vec{p} = \hbar \vec{k}$ pour un vecteur d'onde $\vec{k}$) .

Langer [93] a montré que la conductivité à fréquence et température nulle résulte de la forme

$$\Phi_0(E, \varrho) = \frac{2 \pi e^2}{3(m^*)^2 \hbar} \sum_{\vec{p}} \langle 2 \operatorname{Re} K^{++}(\vec{p}) - 2 K^{+-}(\vec{p}) \rangle .$$

avec

$$K^{\pm \epsilon}(\vec{p}) = \sum_{\vec{p}'} \vec{p} \cdot \vec{p}' \langle G^{\pm}(\vec{p}, \vec{p}', E) G^{\epsilon}(\vec{p}', \vec{p}, E) \rangle ,$$

où le symbole $\langle \dots \rangle$ représente une moyenne sur les impuretés . Cette moyenne a été explicitée en transformant la fonction de Green en termes de l'intégrale de parcours de Feynman , d'après la méthode suggérée par Edwards et Gulyaev (1964) [17] . Puis , en supposant $\langle GG \rangle \approx \langle G \rangle \cdot \langle G \rangle$, Jones [25] a montré

$$\Phi_0(E, \varrho) = \frac{e^2 \hbar^3}{3 \pi^3 (m^*)^2} \int_0^\infty k^4 \{ \text{Im} \langle G(k, E) \rangle \}^2 dk \quad (V.1)$$

Dans cette expression , $\text{Im} \langle G(k, E) \rangle$ est la partie imaginaire de la fonction de Green , calculée à partir de la méthode des cumulants et de l'approximation gaussienne [25] ,

$$-\frac{\text{Im} \langle G(k, E) \rangle}{2 \pi} = \frac{1}{\sigma \sqrt{2 \pi}} \exp \left[-\frac{(E - \hbar^2 k^2 / 2 m^*)^2}{2 \sigma^2} \right],$$

le coefficient σ étant défini à partir de la formule (II.14) .

C'est une approximation au second ordre pour l'énergie potentielle ; elle est raisonnable quand l'énergie E se situe près de la limite de bande .

Substituant la valeur de $\text{Im} \langle G(k, E) \rangle$ dans la formule (V.1) , posant $t = \hbar^2 k^2 / m^* \sigma^2$ et remarquant que

$$D_\nu(z) = \frac{e^{-z^2/4}}{\Gamma(-\nu)} \int_0^\infty t^{-\nu-1} e^{-(t^2/2 + zt)} dt ,$$

on obtient

$$\Phi_0(E, \varrho) = \gamma \exp \left(-\frac{E^2}{2 \sigma^2} \right) D_{-5/2} \left(-\frac{E \sqrt{2}}{\sigma} \right) , \quad (V.3)$$

avec

$$\gamma = \frac{\Gamma(5/2) 2^{5/4} e^2 \sqrt{m^* \sigma}}{3 \pi^2 \hbar^2} .$$

où la fonction parabolique cylindrique $D_\nu(x)$ peut être développée en série infinie comme dans le chapitre II . On en déduit [28]

$$\Phi_0(E, \varrho) = X \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{m! l!} \left\{ \left[\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \right]^2 \Gamma\left(m + \frac{5}{4}\right) \left(\frac{E}{\sigma}\right)^{2(m+l)} + \right. \\ \left. 2 \sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \Gamma\left(m + \frac{7}{4}\right) \left(\frac{E}{\sigma}\right)^{2(m+l)+1} + \right. \\ \left. \Gamma\left(m + \frac{3}{2}\right) \left(\frac{E}{\sigma}\right)^{2(m+l)+1} \right\}, \quad (\text{V. 4})$$

avec

$$X = \frac{\Gamma\left(\frac{5}{2}\right) e^2 \sqrt{m^* \sigma}}{3 \pi^2 \Gamma\left(\frac{7}{4}\right) \Gamma\left(\frac{5}{4}\right) \hbar^2}.$$

L'expression de la conductivité électrique statique $\sigma_0(T, \rho)$ dans un champ magnétique nul à une température finie T et pour un dopage ρ dans un milieu isotrope en résulte [28] :

$$\sigma_0(T, \varrho) = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_0(E, \varrho) \left\{ - \frac{\partial f(E)}{\partial E} \right\} dE, \quad (\text{V. 5})$$

$f(E)$ étant la fonction de distribution de Fermi-Dirac .

En utilisant , comme dans les chapitres précédents , pour les basses températures le développement

$$\int_{-\infty}^{\infty} E^p \left\{ - \frac{\partial f(E)}{\partial E} \right\} dE = \sum_{\mu=0,2,\dots}^p C_p^{\mu} (k_B T)^{\mu} E_F^{p-\mu} (2^{\mu} - 2) \pi^{\mu} B_{\mu/2},$$

on obtient finalement:

$$\sigma_0(T, \varrho) = X \sum_{m,l}^{\infty} \frac{(-1)^l}{m! l!} \times$$

$$\times \left\{ \frac{[\Gamma(1/2)]^2 \Gamma(m+5/4)}{\Gamma(m+1/2)} \sum_{\mu=0,2,\dots}^{2(m+l)} C_p^{\mu} \frac{(k_B T)^{\mu} E_F^{p-\mu}}{\sigma^p} (2^{\mu} - 2) \pi^{\mu} B_{\mu/2} + \right.$$

$$\left. + 2 \pi \frac{\Gamma(3/2) \Gamma(m+7/4)}{\Gamma(m+5/2)} \sum_{\mu'=0,2,\dots}^{2(m+l)+1} C_{p'}^{\mu'} \frac{(k_B T)^{\mu'} E_F^{p'-\mu'}}{\sigma^{p'}} (2^{\mu'} - 2) \pi^{\mu'} B_{\mu'/2} \right\} \quad (V.6)$$

La résistivité ρ_0 et la mobilité μ_0 sont alors définies par les relations

$$\varrho_0(T, \varrho) = \frac{1}{\sigma_0(T, \varrho)}, \quad (V.7)$$

$$\mu_0(T, \varrho) = \frac{\sigma_0(T, \varrho)}{n_0(T, \varrho) e}, \quad (V.8)$$

où n_0 est la densité des électrons .

B - Effet Hall .

La conductivité de Hall σ_H et le coefficient de Hall R , quand le champ magnétique H est appliqué le long de l'axe des z , sont définis comme suit (cf. Appendice A) :

$$\sigma_{11} = \frac{\sigma_{xy}}{H}, \quad (V.9)$$

$$R = \frac{\sigma_{11}}{\sigma_0}, \quad (H \rightarrow 0), \quad (V.10)$$

où σ_{xy} est la composante xy de la conductivité statique des électrons .

Utilisant la représentation spectrale des fonctions de Green thermiques , Fukuyama et ses collaborateurs [27] ont montré que

$$\sigma_{xy}(T, \varrho) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_{xy}(E, \varrho) \left\{ -\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right\} dE, \quad (\text{V. 11})$$

où

$$\Phi_{xy}(E, \varrho) = \frac{2 e^2 \hbar^4 \omega^*}{9 \pi^3 (m^*)^2} \int_0^{\infty} k^4 \{ \text{Im} \langle G(k, E) \rangle \}^3 dk, \quad (\text{V. 12})$$

avec $\omega^* = \frac{e \hbar}{m^* c}$.

Appliquant la même méthode que précédemment, on obtient

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}(T, \varrho) = & -Y \sum_{m, l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{m! l!} \left(\frac{3}{2} \right)^{m+l} \times \\ & \times \left\{ \frac{[\Gamma(1/2)]^2}{\Gamma(m+1/2)} \sum_{\mu=0, 2, \dots}^{p=2(m+l)} C_p^\mu \frac{(k_B T)^\mu E_F^{p-\mu}}{\sigma^p} (2^\mu - 2) \pi^\mu B_{\mu/2} + \right. \\ & \left. + \frac{\sqrt{6} \pi}{\Gamma(m+3/2)} \Gamma(3/2) \Gamma(m+7/4) \sum_{\mu'=0, 2, \dots}^{p'=2(m+l)+1} C_{p'}^{\mu'} \frac{(k_B T)^{\mu'} E_F^{p'-\mu'}}{\sigma^{p'}} (2^{\mu'} - 2) \pi^{\mu'} B_{\mu'/2} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{V. 13})$$

avec

$$Y = \frac{\Gamma(5/2) 2^{11/4} e^3 \hbar}{3^{13/4} \Gamma(7/4) \Gamma(5/4) \pi^{3/2} \hbar c \sqrt{m^* \sigma}}.$$

En substituant l'expression de l'énergie de Fermi E_F calculée au chapitre III, les formules (V.6) et (V.13) conduisent, en explicitant seulement les premiers termes, à

$$\begin{aligned} \sigma_0(T, \varrho) = & 1.61 X \left\{ 1 + 2.02 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + 1.49 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^2 + 0.33 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^3 + \dots - \right. \\ & \left. - 0.04 \left(\frac{\pi k_B T}{\sigma} \right)^2 + 0.05 \left(\frac{\pi k_B T}{\sigma} \right)^2 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + \dots \right\}, \end{aligned} \quad (\text{V. 14})$$

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}(T, \varrho) = & -1.61 Y \left\{ 1 + 2.48 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + 2.24 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^2 + 0.61 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^3 + \dots + \right. \\ & \left. + 0.11 \left(\frac{\pi k_B T}{\sigma} \right)^2 + 0.04 \left(\frac{\pi k_B T}{\sigma} \right)^2 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (\text{V. 15})$$

où E_0 est l'énergie de Fermi correspond à $T = H = 0$.

Les facteurs X et Y des relations (V.14) et (V.15) dépendent, l'un et l'autre, du dopage ρ et de la température T (cf. l'équation (III.16)). Les expressions (V.14) et (V.15) peuvent alors être mises sous les formes

$$\sigma_0(T, \varrho) = C_1 \varrho^{2/9} \left\{ 1 + 1.84 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + 1.23 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^2 + 0.50 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^3 + \dots - \right. \\ \left. - 0.02 \left(\frac{\pi k_B T}{\sigma} \right)^2 + 0.06 \left(\frac{\pi k_B T}{\sigma} \right)^2 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + \dots \right\}, \quad (V.16)$$

$$\sigma_{xy}(T, \varrho) = -C_2 \varrho^{-2/9} \left\{ 1 + 2.66 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + 1.99 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^2 - 0.72 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^3 + \dots + \right. \\ \left. + 0.09 \left(\frac{\pi k_B T}{\sigma} \right)^2 + 0.03 \left(\frac{\pi k_B T}{\sigma} \right)^2 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + \dots \right\}, \quad (V.17)$$

où

$$C_1 = \frac{1.61 \Gamma(5/2)}{3\pi^2 \Gamma(7/4) \Gamma(5/4)} \frac{e^2 \sqrt{m^* A}}{\hbar^2}, \\ C_2 = \frac{1.61 \Gamma(5/2) 2^{11/4}}{3^{13/4} \Gamma(7/4) \Gamma(5/4) \pi^{3/2}} \frac{e^3 H}{\hbar c \sqrt{m^* A}}.$$

Les autres grandeurs physiques s'en déduisent

$$\varrho_0(T, \varrho) = C_1^{-1} \varrho^{-2/9} \left\{ 1 - 1.84 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + 2.15 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^2 - 2.18 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^3 + \dots + \right. \\ \left. + 0.02 \left(\frac{\pi k_B T}{\sigma} \right)^2 - 0.12 \left(\frac{\pi k_B T}{\sigma} \right)^2 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + \dots \right\}, \quad (V.18)$$

$$\mu_0(T, \rho) = \frac{C_1 \rho^{-7/9}}{e} \left\{ 1 + 1.84 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + 1.23 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^2 + 0.50 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^3 + \dots - \right. \\ \left. - 0.02 \left(\frac{\pi k_B T}{\sigma} \right)^2 + \dots \right\}, \quad (V.19)$$

et

$$R(T, \varrho) = -\frac{C_2}{H C_1^2} \varrho^{-2/3} \left\{ 1 - 1.02 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) - 0.11 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^2 + 0.99 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^3 + \dots + \right. \\ \left. + 0.13 \left(\frac{\pi k_B T}{\sigma} \right)^2 - 0.52 \left(\frac{\pi k_B T}{\sigma} \right)^2 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + \dots \right\}. \quad (V.20)$$

C - Discussion .

Comme dans les autres chapitres nous allons étudier deux cas typiques de semi-conducteurs .

C.1 - Cas où $n_o = p - n_a$

(i) Semi-conducteur non compensé . Nous considérons d'abord un effet d'écran dû seulement aux électrons . On obtient , dans cette approximation [28] , les expressions suivantes :

Conductivité électrique:

$$\sigma_o(\rho, T) \approx C_1 (\rho)^{2/9} \left\{ 1 + 1.84x + 1.23x^2 - 0.02 \left(\frac{\pi kT}{A \rho^{4/9}} \right)^2 \right\} , \quad (V.21)$$

Résistivité :

$$\rho_o(\rho, T) \approx C_1^{-1} (\rho)^{-2/9} \left\{ 1 + 1.84x + 2.15x^2 + 0.02 \left(\frac{\pi kT}{A \rho^{4/9}} \right)^2 \right\} , \quad (V.22)$$

Mobilité:

$$\mu_o(\rho, T) \approx \frac{C_1 (\rho)^{-7/9}}{e} \left\{ 1 + 1.84x + 1.23x^2 - 0.02 \left(\frac{\pi kT}{A \rho^{4/9}} \right)^2 \right\} , \quad (V.23)$$

Coefficient de Hall :

$$R(\rho, T) \approx - \frac{C_2 (\rho)^{2/3}}{H C_1^2} \left\{ 1 - 1.02x - 0.11x^2 + 0.13 \left(\frac{\pi kT}{A \rho^{4/9}} \right)^2 \right\} . \quad (V.24)$$

On en déduit d'abord que le signe du coefficient de Hall dans la bande d'impuretés pour un semi-conducteur de type n est toujours négatif comme l'avait prévu Mott [38] . On sait que , par contre ; dans le cas des électrons d'une bande ordinaire le signe du coefficient de Hall peut être négatif ou positif . Pour $|x| \ll 1$, $n_a = 0$ et une température suffisamment basse , la conductivité est proportionnelle à la puissance 2/9 de la densité des impuretés (ou des électrons) ; la résistivité à la puissance -2/9 ; la mobilité à la puissance -7/9 ; et le coefficient de Hall à la puissance -2/3. Ces conclusions ne sont pas très différentes de celles de la théorie de Fukuyama et ses collaborateurs [27] où la conductivité est proportionnelle à la puissance 3/9 de la densité des impuretés , la résistivité à la puissance -3/9 et la mobilité à la puissance -6/9 . Pour le coefficient de Hall , les

auteurs ont trouvé une proportionnalité à la puissance -1 de la densité des électrons , en utilisant seulement un raisonnement intuitif , comme dans la théorie des électrons dégénérés où $R_0 \approx -1/(n_0 e c)$. On voit d'autre part que , pour un dopage donné , quand la température T augmente , σ_0 , μ_0 décroissent légèrement tandis que ρ_0 et R augmentent légèrement .

Par exemple , pour n-Ge non compensé , les coefficients de transport en fonction de ρ sont donnés dans les tableaux 13 et 14 .

Tableau 13 - Coefficients de transport dans le cas où $L = L_e$.

ρ (cm ⁻³)	3×10^{17}	1×10^{18}	1.9×10^{18}	4×10^{18}	3.27×10^{19}
σ_0 ($\Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$)	21.163	33.316	44.553	61.674	185.226
ρ_0 (Ωcm)	0.040	0.029	0.022	0.016	0.009
μ_0 (cm ² /Vs)	476.219	208.010	139.226	96.271	36.167
R (cm ³ /C)	-37.80	-15.518	-9.11	-5.172	-0.696
R_0 (cm ³ /C)	-20.830	-6.250	-3.125	-1.560	-0.190
$\gamma = (R/R_0)$	1.8	2.4	2.9	3.3	3.6

On vérifie d'abord que la résistivité , la mobilité et le coefficient de Hall diminuent quand le dopage augmente pour une température suffisamment basse .

La valeur de la résistivité dans ce modèle pour $\rho = 3 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ est 0.040 Ωcm à basse température (et elle est alors presque indépendante de la température) ; la valeur observée [10] est 0.030 Ωcm . D'autre part , par une méthode de grappes , Matsubara et Toyozawa [23] ont trouvé $\rho_0^{M-T} \approx 0.041 \Omega \text{cm}$ pour un même dopage et à une température suffisamment basse . Toujours dans les mêmes conditions de dopage et de température , notre modèle donne $R \approx -37.8 \text{cm}^3/\text{C}$, tandis que par l'expérience [1] on a trouvé $R_{\text{exp.}} = -24 \text{cm}^3/\text{C}$; le rapport est donc $R/R_{\text{exp.}} = 1.5$. On peut conclure que , dans l'intervalle considéré de concentrations , la théorie est en bon accord avec l'expérience .

Pour $\rho > 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, le rapport entre le coefficient de Hall calculé dans notre modèle et celui trouvé à partir de la théorie des électrons dégénérés (R_o) est à peu près égal à 3. Fukuyama et ses collaborateurs [27] ont trouvé un rapport exactement égal à 2.

En présence de l'effet d'écran global ($1/L = 1/L_i + 1/L_e$), le coefficient σ caractérisant les impuretés diminue ; donc la conductivité et la mobilité diminuent, la résistivité et le coefficient de Hall augmentent.

Tableau 14 - Coefficients de transport dans le cas où $1/L = 1/L_i + 1/L_e$.

$\rho \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	10^{18}	1.9×10^{18}	4×10^{18}	3.27×10^{19}
$\sigma_o (\Omega^{-1} \text{cm}^{-1})$	30.664	41.389	57.406	185.086
$\rho_o (\Omega \text{cm})$	0.032	0.024	0.017	0.005
$\mu_o (\text{cm}^2/\text{Vs})$	191.46	129.338	89.610	36.138
$R(\text{cm}^3/\text{C})$	-20.093	-11.351	-6.513	-0.991
R/R_o	3.2	3.6	4.2	5.2

(ii) Semi-conducteur partiellement compensé. Une étude systématique a conduit aux résultats présentés dans les tableaux 15 et 16.

Tableau 15 - Coefficients de transport dans le cas où $L = L_e$ avec $n_a = 1/2\rho$.

$\rho \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	10^{18}	1.9×10^{18}	4×10^{18}	3.27×10^{19}
$\sigma_o (\Omega^{-1} \text{cm}^{-1})$	27.475	34.158	44.088	79.316
$\rho_o (\Omega \text{cm})$	0.036	0.029	0.023	0.012
$\mu_o (\text{cm}^2/\text{Vs})$	343.102	213.490	137.640	30.991
$R(\text{cm}^3/\text{C})$	-13.46	-8.26	-4.98	-1.17
$R_o (\text{cm}^3/\text{C})$	-12.50	-6.25	-3.12	-0.38
$\gamma = R/R_o$	1.07	1.32	1.59	3.07

Dans l'intervalle considéré de concentrations en impuretés, le rapport

$\gamma = R/R_o$ est à peu près égal à 2 .

Tableau 16 - Coefficients de transport dans le cas où $1/L = 1/L_i + 1/L_e$ avec $n_a = 1/2\rho$.

ρ (cm ⁻³)	10^{18}	1.9×10^{18}	4×10^{18}	3.27×10^{19}
$\sigma_o (\Omega^{-1} \text{cm}^{-1})$	23.867	30.364	38.318	67.273
$\rho_o (\Omega \text{cm})$	0.042	0.033	0.026	0.015
$\mu_o (\text{cm}^2/\text{Vs})$	298.040	187.770	119.620	26.271
$R (\text{cm}^3/\text{C})$	-21.080	-11.973	-7.681	-1.929
$\gamma = R/R_o$	1.68	1.91	2.46	5.05

On trouve ici le rapport R/R_o est à peu près égal à 3 .

Ces résultats sont résumés respectivement sur les figures 9 à 12 .

C.2 - Cas où $n_o = \beta \rho^{1/3} - n_a$.

Les tableaux 17 et 18 donnent des résultats numériques , comme dans les chapitres précédents , pour n-GaAs non compensé .

Tableau 17 - Coefficients de transport dans le cas où $L = L_e$.

ρ (cm ⁻³)	8×10^{18}	1.89×10^{19}	10^{20}
$\sigma_o (\Omega^{-1} \text{cm}^{-1})$	70.56	67.09	67.36
$\rho_o (\Omega \text{cm})$	0.0142	0.0149	0.0148
$\mu_o (\text{cm}^2/\text{Vs})$	83.703	66.718	51.080
$R (\text{cm}^3/\text{C})$	-6.493	-4.428	-1.785
$R_o = \frac{1}{n_o e} (\text{cm}^3/\text{C})$	-1.446	-1.09	-0.73
$\gamma = R/R_o$	4.49	4.06	2.27

Tableau 18 - Coefficients de transport dans le cas où $1/L = 1/L_i + 1/L_e$.

$\rho \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	8×10^{18}	1.89×10^{19}	10^{20}
$\sigma_o (\Omega^{-1} \text{cm}^{-1})$	64.956	57.989	52.869
$\rho_o (\Omega \text{cm})$	0.015	0.017	0.019
$\mu_o (\text{cm}^2/\text{Vs})$	93.970	62.718	38.332
$R(\text{cm}^3/\text{C})$	-9.233	-7.011	-3.734
$\gamma = R/R_o$	6.3	6.4	5.1

Ces résultats sont représentés respectivement sur les figures 13 à 16 .

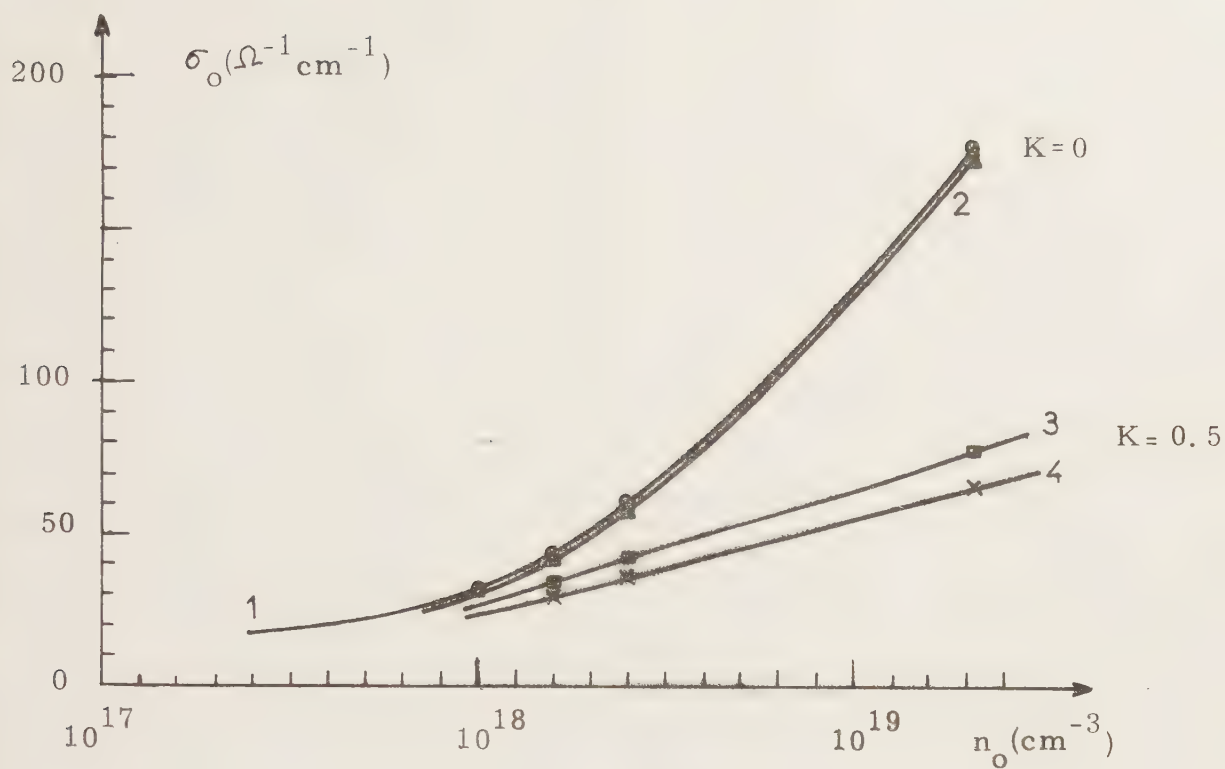


Fig. 9

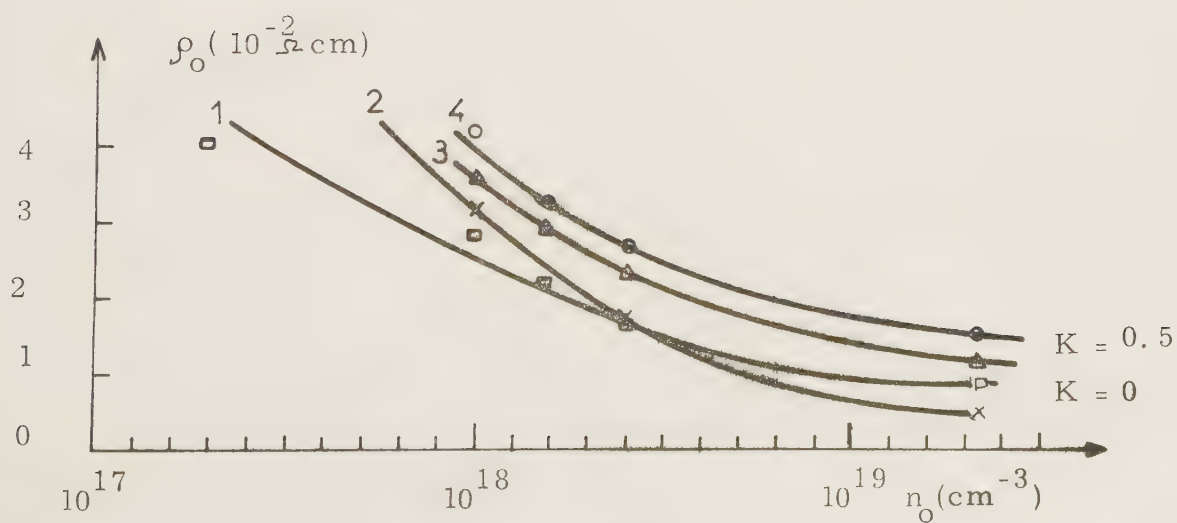


Fig. 10

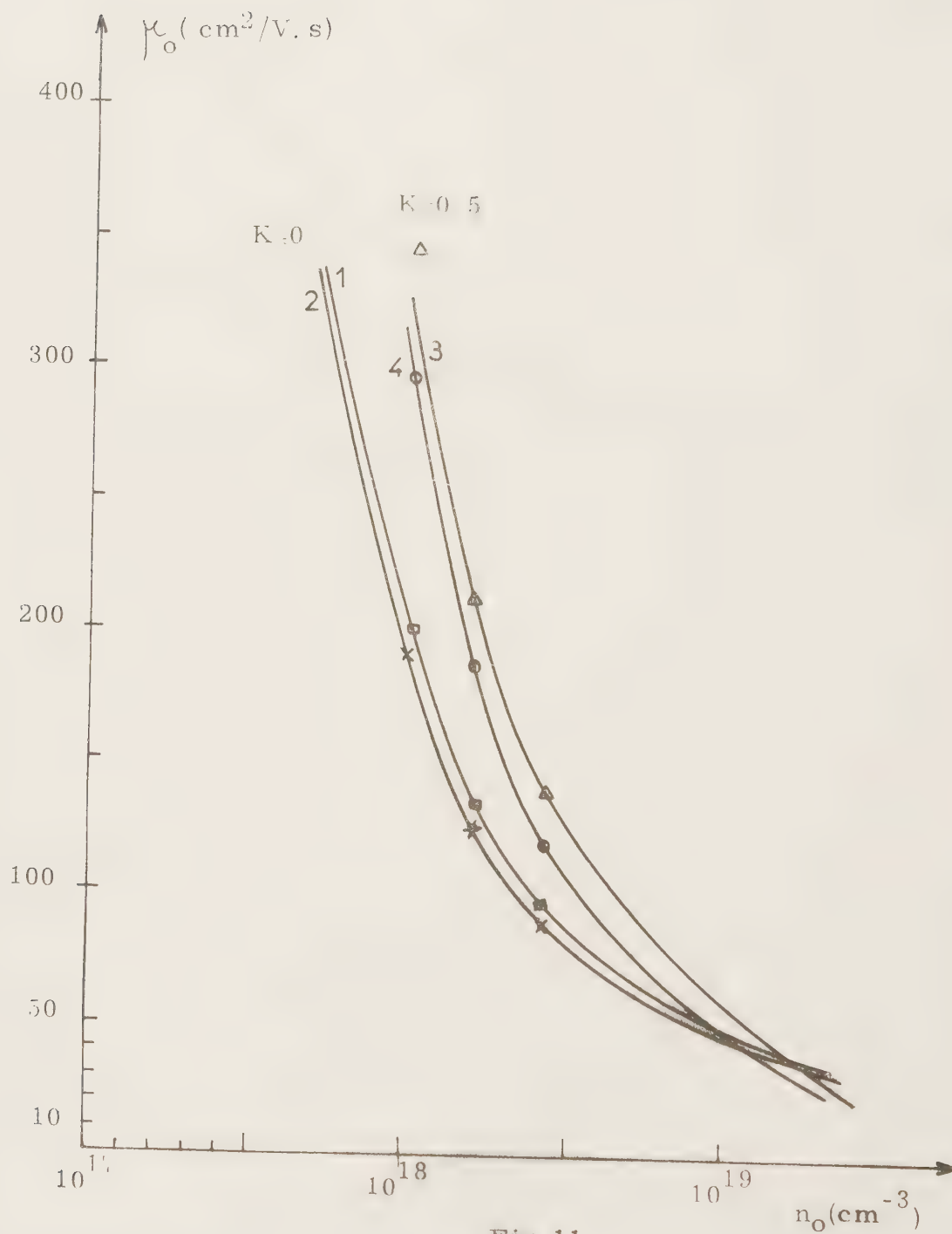


Fig. 11

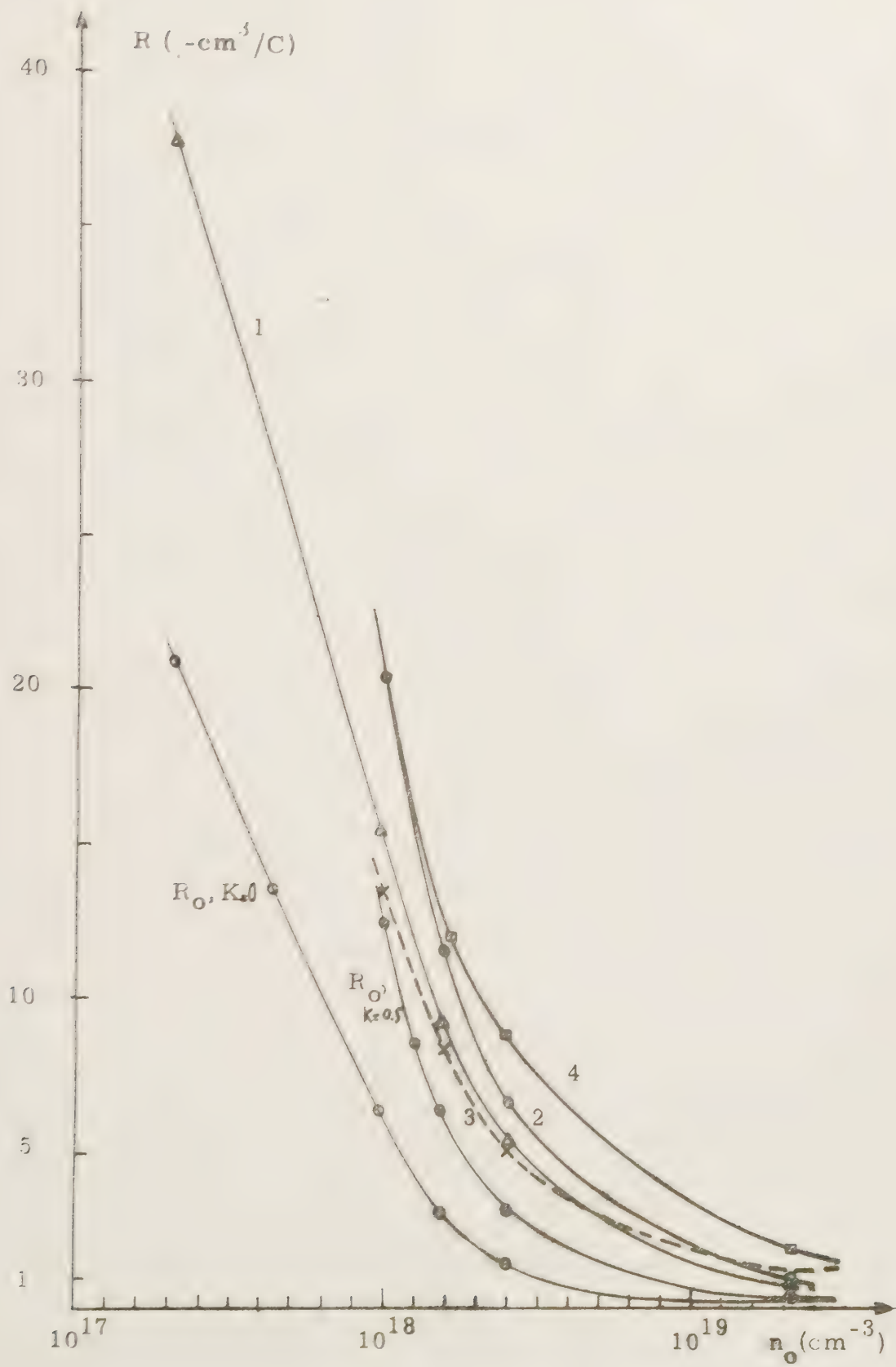


Fig. 12

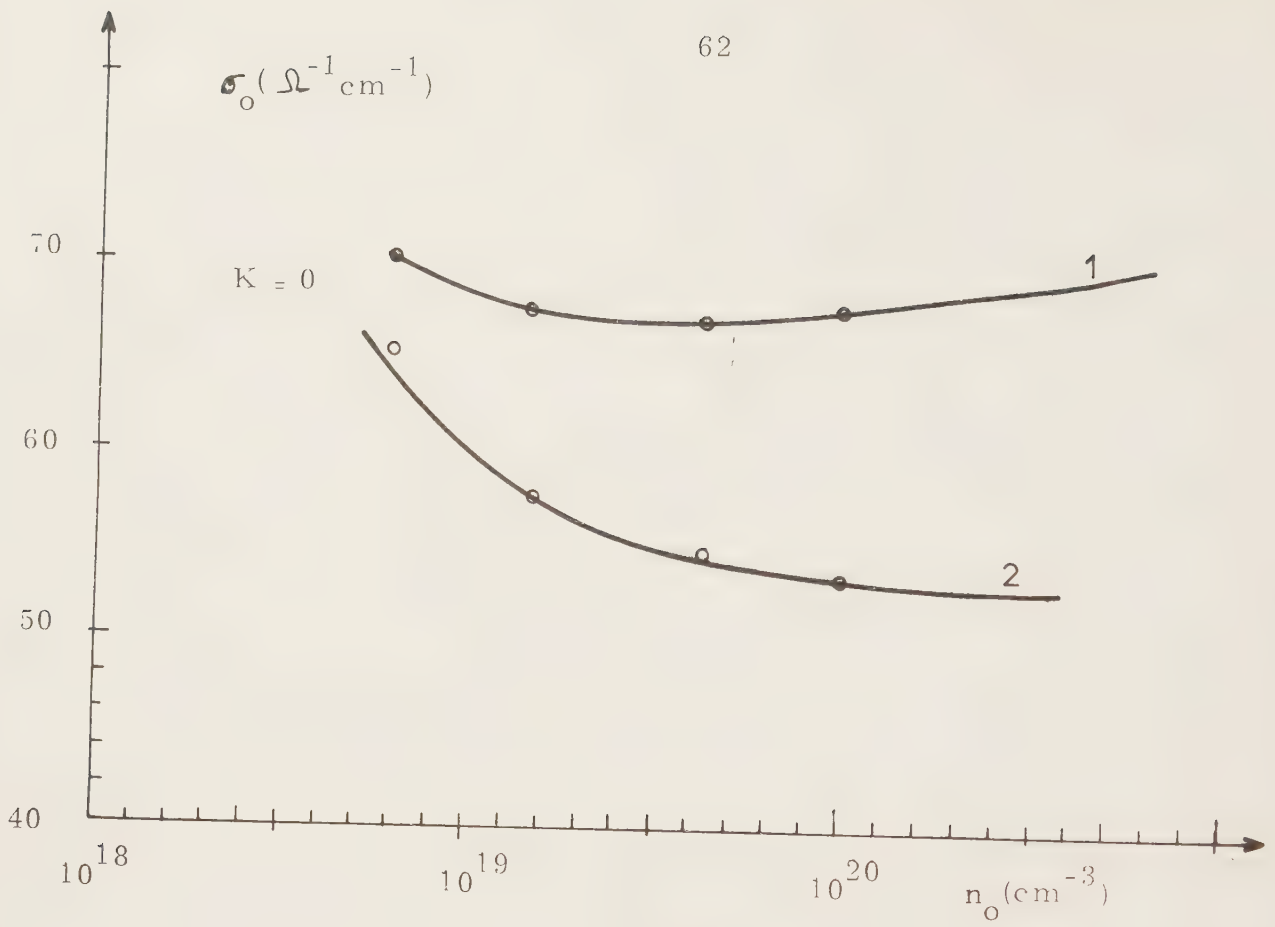


Fig. 13

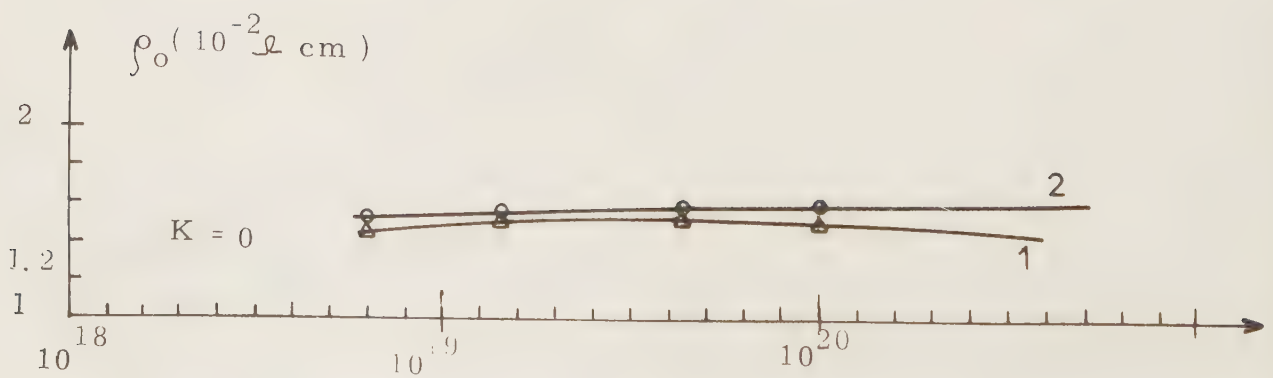


Fig. 14

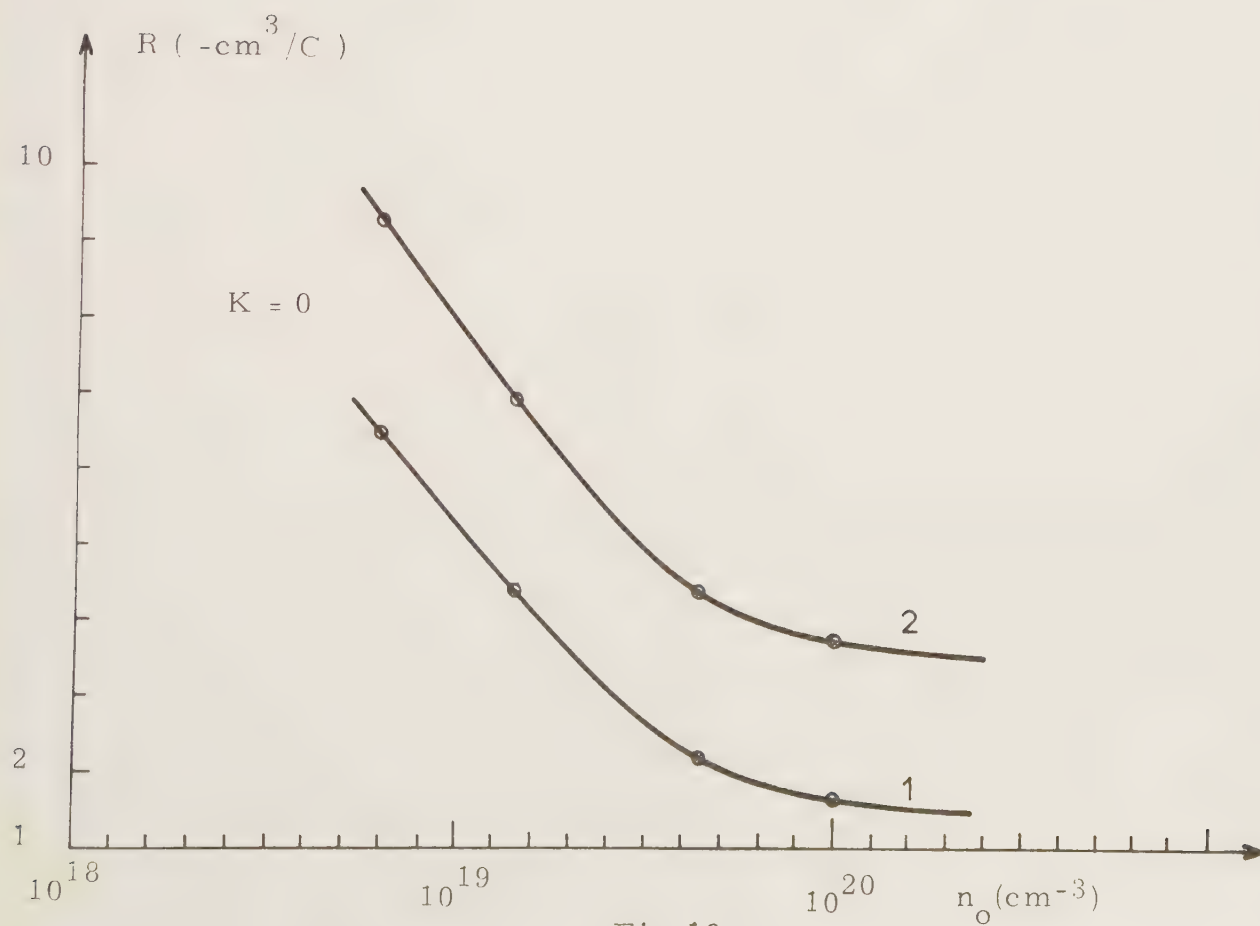
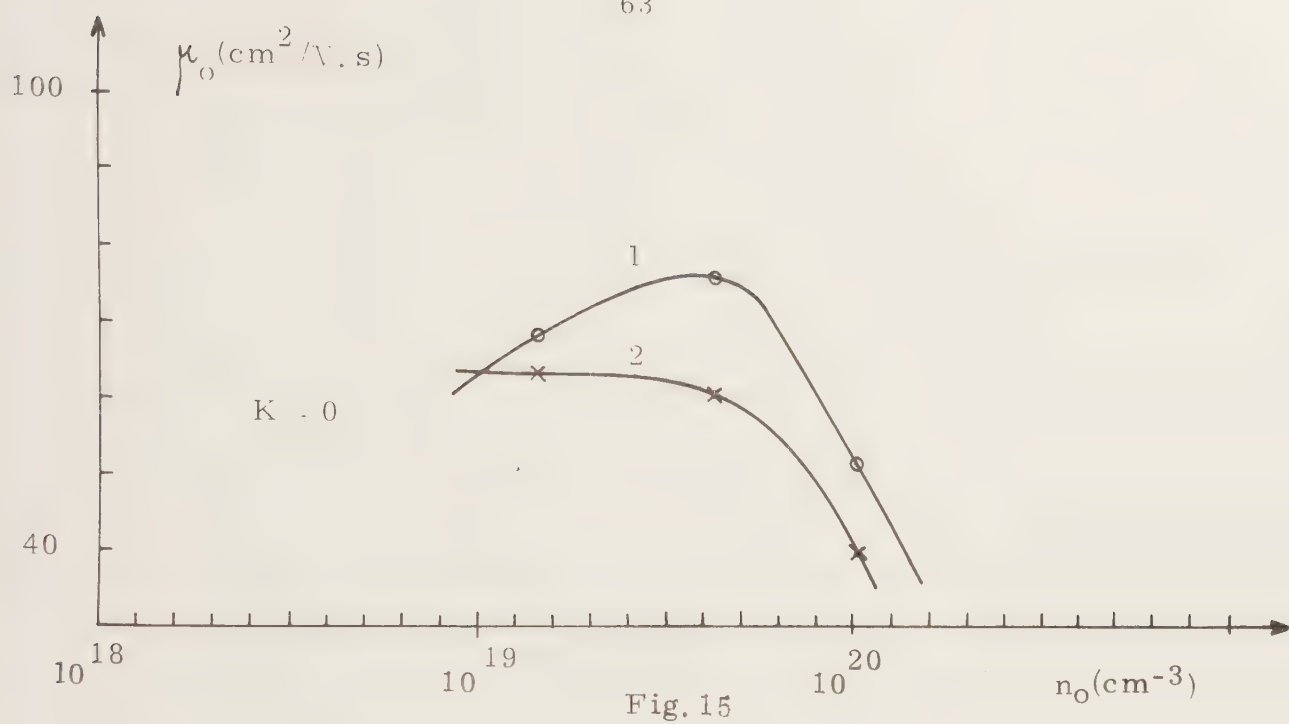


Fig. 16
Fig. 16

VI . Magnétorésistance ordinaire

A - Formalisme général .

Dans ce chapitre nous étudions la magnétorésistance ordinaire des semi-conducteurs très dopés de type n à basse température dans un faible champ magnétique . Le mot de magnétorésistance "ordinaire" intervient par opposition avec la magnétorésistance "extraordinaire" qui a été observée en premier lieu par Furukawa [11] . Cette dernière est négative pour le germanium de type n et positive pour le germanium de type p tandis que la magnétorésistance ordinaire est positive et proportionnelle au carré du champ magnétique H pour un semi-conducteur de type n . D'après Toyozawa [95] la magnétorésistance extraordinaire serait due à la présence des spins localisés et à la corrélation entre les électrons . Ces effets sont négligés dans notre modèle simplifié où nous ne considérons que l'interaction entre électrons et impuretés et l'interaction entre le champ magnétique $\vec{H} = (0, 0, H)$ et le spin électronique $\vec{s} = (0, 0, s_z)$. Notre théorie porte donc uniquement sur la magnétorésistance ordinaire . L'hamiltonien total s'écrit

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 ,$$

avec

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 &= \frac{1}{2m^*} \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + g^* \mu_B^* \vec{H} \cdot \vec{s} , \\ \mathcal{H}_1 &= \sum_{i=1}^N v \cdot (\vec{r} - \vec{R}_i) , \end{aligned}$$

Choisisant le jauge de Landau $\vec{A} = (0, xH, 0)$, on a

$$\mathcal{H}_0 |\alpha\rangle = E_\alpha |\alpha\rangle ,$$

avec

$$E_\alpha = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega^* + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + g^* \mu_B^* H s_z ,$$

où $\alpha = (n, X, k_z, s_z)$ résume les nombres quantiques : on a $s_z = \pm 1/2$ (pour l'état électronique s) ; n est le nombre quantique de Landau , X le centre

de l'orbite cyclotronique, k_z la composante suivant oz du vecteur d'onde $\vec{k}$.

Les éléments diagonaux de la conductivité tensorielle par unité de volume s'écrivent

$$\sigma_{\mu\mu}(T, \varrho, H) = \int \Phi_{\mu\mu}(E, \varrho, H) \left\{ - \frac{\partial f(E)}{\partial E} \right\} dE, \quad (\text{VI. 1})$$

avec

$$\Phi_{\mu\mu} = \frac{h}{7} \sum_{l=2} \sum_{n, X, k_z} \sum_{n'} \langle n, X, k_z | J_{\mu} | n', X, k_z \rangle^2 \text{Im } G_{n, X, k_z}(E) \text{Im } G_{n', X, k_z}(E),$$

où J est l'opérateur de la μ ème composante du courant électrique et (cf. le chapitre II)

$$\begin{aligned} \text{Im } G_{n, X, k_z}(E - g^* \mu_B^* H s_z) = \\ = \frac{2 \sqrt{2} \pi}{(2 \pi l)^2 \sigma} \exp \left[- \frac{1}{2} \left\{ E - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega^* - \frac{\hbar^2 k^2}{2 m^*} - g^* \mu_B^* H s_z \right\}^2 \right]. \end{aligned} \quad (\text{VI. 2})$$

Dans l'expression (VI. 2), l est le rayon cyclotronique du niveau de Landau le plus bas,

$$l = \left(\frac{e H}{h c} \right)^{-1/2} \quad (\text{VI. 3})$$

et σ est toujours le coefficient caractérisant les impuretés, défini dans le chapitre II.

Tenant compte de la règle de sélection pour les éléments des matrices J_x et J_z , Fukuyama et ses collaborateurs [27] ont montré que les composantes transversale et longitudinale de la conductivité statique $\phi_{\mu\mu}$ peuvent s'écrire respectivement

$$\begin{aligned} \Phi_{xx}(E, \varrho, H) = \frac{e^2 \hbar^2 \omega^*}{\pi m^*} \sum_{s_z = \pm 1/2} \sum_{n, X, k_z} (n+1) \text{Im } G_{n, X, k_z}(E - g^* \mu_B^* H s_z) \times \\ \times \text{Im } G_{(n+1), X, k_z}(E - g^* \mu_B^* H s_z), \end{aligned} \quad (\text{VI. 4})$$

$$\Phi_{zz}(E, \varrho, H) = \frac{e^2 \hbar^3}{\pi (m^*)^2} \sum_{s_z = \pm 1/2} \sum_{n, X, k_z} k_z^2 [\text{Im } G_{n, X, k_z}(E - g^* \mu_B^* H s_z)]^2. \quad (\text{VI. 5})$$

B - Conductivité dans un faible champ magnétique .

En introduisant l'expression (VI. 2) dans ces équations , en transformant les sommes en des intégrales définies et en tenant compte de la condition de faible champ magnétique ($\hbar \omega^* \ll \sigma$) , les relations (VI. 4) et (VI. 5) donnent approximativement [33] :

$$\begin{aligned} \Phi_{xx}(E, \varrho, H) \approx & \frac{4 e^2 \omega^*}{\pi^2 \sigma} \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} dk_z (n + 1/2) \frac{\hbar \omega^*}{\sigma} \times \\ & \times \exp \left[- \frac{\left\{ E - (n + 1/2) \hbar \omega^* - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2 m^*} \pm \frac{g^* \mu_B^* H}{2} \right\}^2}{\sigma^2} \right] \end{aligned} \quad (\text{VI. 6})$$

et

$$\begin{aligned} \Phi_{zz}(E, \varrho, H) \approx & \frac{4 e^2 \omega^* \hbar^2}{\pi^2 m^* \sigma^2} \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} dk_z k_z^2 \times \\ & \times \exp \left[- \frac{\left\{ E - (n + 1/2) \hbar \omega^* - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2 m^*} \pm \frac{g^* \mu_B^* H}{2} \right\}^2}{\sigma^2} \right] \end{aligned} \quad (\text{VI. 7})$$

ou

$$\begin{aligned} \Phi_{xx} \approx & \frac{2^{5/4} \Gamma(\frac{1}{2})}{\pi^2} \frac{e^2 \sqrt{m^*} \sigma}{\hbar^2} \frac{\hbar \omega^*}{\sigma} \sum_{n=0}^{\infty} (n + 1/2) \left(\frac{\hbar \omega^*}{\sigma} \right) \times \\ & \times \exp \left[- \frac{\left\{ E \pm \frac{g^* \mu_B^* H}{2} - M \right\}^2}{2 \sigma^2} \right] D_{-1/2} \left[- \frac{\sqrt{2}}{\sigma} \left(E \pm \frac{g^* \mu_B^* H}{2} - M \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{VI. 8})$$

et

$$\Phi_{zz} = \frac{2^{7/4}}{\pi^2} \frac{\Gamma(\frac{3}{2})}{h^2} \frac{e^2 \sqrt{m^*} \sigma}{\hbar^2} \frac{\hbar \omega^*}{\sigma} \sum_{n=0}^{\infty} \exp \left[- \left\{ E \pm \frac{g^* \mu_B^* H}{2 \sigma^2} - M \right\}^2 \right] D_{-3/2} \left[- \frac{\sqrt{2}}{\sigma} \left(E \pm \frac{g^* \mu_B^* H}{2} - M \right) \right], \quad (\text{VI. 9})$$

avec $M = (n + 1/2) \hbar \omega^*$.

On a utilisé la seconde formule de sommation d'Euler et un développement en série pour calculer la somme sur n dans les expressions (VI. 8) et (VI. 9) avec la condition de faible champ magnétique ($\hbar \omega^* \ll \sigma$) assurant la validité de l'approximation. La composante transversale de la conductivité statique en présence d'un faible champ magnétique s'écrit alors

$$\Phi_{xx}(E, \varrho, H) \approx \Phi_{xx}^{(0)}(E, \varrho) + \left(\frac{\mu_B^* H}{\sigma} \right)^2 \Phi_{xx, \text{orb}}^{(2)}(E, \varrho) + \left(\frac{\mu_B^* H}{\sigma} \right)^2 \Phi_{xx, \text{spin}}^{(2)}(E, \varrho).$$

où $\Phi_{xx}^{(0)}(E)$ est la conductivité statique en l'absence du champ magnétique,

$$\Phi_{xx}^{(0)}(E, \varrho) = X_1 \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left\{ \delta_1 \left[\Gamma \left(m + \frac{1}{2}; \left(\frac{E}{\sigma} \right)^2 \right) + \left(\frac{E}{\sigma} \right) \Gamma \left(m + \frac{1}{2}; \left(- \frac{E}{\sigma} \right)^2 \right) \right] + \delta_2 \left[\Gamma \left(m + \frac{3}{2}; \left(\frac{E}{\sigma} \right)^2 \right) + \left(\frac{E}{\sigma} \right) \Gamma \left(m + \frac{1}{2}; \left(- \frac{E}{\sigma} \right)^2 \right) \right] \right\}, \quad (\text{VI. 10})$$

$\Phi_{xx, \text{orb}}^{(2)}$ la contribution due au mouvement orbital,

$$\Phi_{xx, \text{orb}}^{(2)}(E, \varrho) = - \frac{X_1}{2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left[\delta_1 \Gamma \left(m + \frac{1}{2}; \left(\frac{E}{\sigma} \right)^2 \right) + \delta_2 \Gamma \left(m + \frac{1}{2}; \left(\frac{E}{\sigma} \right)^2 \right) \right]. \quad (\text{VI. 11})$$

et $\Phi_{xx, \text{spin}}^{(2)}(E, \varrho)$ la contribution venant du dédoublement de spin,

$$\begin{aligned} \Phi_{xx, \text{spin}}^{(2)}(E, \varrho) &= \frac{1}{2!} \left(\frac{g^*}{2} \right)^2 \frac{(\mu_B^*)^2 \Phi_{xx}^{(0)}(E, \varrho)}{\left(\frac{E}{\sigma} \right)^2} \\ &= \left(\frac{g^*}{2} \right)^2 X_1 \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{m! l!} \left\{ \delta_1 \left(\frac{E}{\sigma} \right)^{2m-2l} + \delta_2 \left(\frac{E}{\sigma} \right)^{2m-2l-1} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{VI. 12})$$

Dans ces expressions on a

$$\delta_1 = \frac{[\Gamma(\frac{1}{2})]^2 \Gamma(m+1/4)}{\Gamma(m+1/2)}$$

$$\delta_2 = \frac{2\sqrt{\pi} \Gamma(\frac{3}{2}) \Gamma(m+3/4)}{\Gamma(m+3/2)},$$

et

$$X_1 = \frac{\Gamma(\frac{1}{2}) e^2}{\Gamma(\frac{3}{4}) \Gamma(\frac{1}{4}) \pi^2 \hbar^2} \overline{m^* \sigma}$$

$$X_1' = (1/3) X_1.$$

Utilisant la formule valable aux basses températures [20, 33],

$$\int_{-\infty}^{\infty} E^p \left\{ - \frac{\partial f(E)}{\partial E} \right\} dE = \sum_{\mu=0,2,\dots}^p C_p^\mu (k_B T)^\mu \frac{E_F^{p-\mu} (2^\mu - 2) \pi^\mu}{\sigma^{2\mu+2}} B_{(1/2)\mu}$$

et le développement en série de la fonction Gamma incomplète,

$$\Gamma(v; u) = \Gamma(v) - \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{l!} \frac{u^{v+l}}{(v+l)}$$

on obtient successivement, à partir des relations (VI.1), (VI.10), (VI.11) et (VI.12), les expressions suivantes :

Conductivité en l'absence du champ magnétique :

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}^{(0)}(T, \varrho) \approx X_1 & \left\{ \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} [\delta_1 \Gamma(m+1) - \delta_2 \Gamma(m+3/2)] + \right. \\ & + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} [\delta_1 \Gamma(m+1/2) - \delta_2 \Gamma(m+1)] \left(\frac{E_F}{\sigma} \right) + \\ & + \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l \delta_1}{m! l! (2m+2l+1) (m+l+1)} \times \\ & \times \sum_{\mu=0,2}^{p=2m+2l+2} \frac{C_p^\mu (k_B T)^\mu E_F^{p-\mu} (2^\mu - 2) \pi^\mu}{\sigma^{2m+2l+2}} B_{(1/2)\mu} + \\ & + \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l \delta_2}{m! l! (2m+2l+3) (m+l+1)} \times \\ & \times \sum_{\mu=0,2,\dots}^{p=2m+2l+3} \frac{C_p^\mu (k_B T)^\mu E_F^{p-\mu} (2^\mu - 2) \pi^\mu}{\sigma^{2m+2l+3}} B_{(1/2)\mu} \left. \right\}. \end{aligned}$$

(VI.13)

Contribution orbitale à la conductivité transversale :

$$\begin{aligned} \sigma_{xx, \text{orb}}^{(2)}(T, \varrho, H) &\approx -\left(\frac{X_1}{2}\right)\left(\frac{\mu_B^* H}{\sigma}\right)^2 \times \\ &\times \left[\sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \{ \delta_1 \Gamma(m+1/2) + \delta_2 \Gamma(m+1) \} - \right. \\ &- \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{2(-1)^l \delta_1}{m! l! \sigma^{2m+2l+1}} \sum_{\mu=0,2,\dots}^{p=2m+2l+1} \frac{C_p^\mu (k_B T)^\mu E_F^{p-\mu} (2^\mu - 2) \pi^\mu}{2^{m+l+1}} B_{(1/2)\mu} - \\ &\left. - \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l \delta_2}{m! l! \sigma^{2m+2l+2}} \sum_{\mu'=0,2,\dots}^{p=2m+2l+2} \frac{C_p^{\mu'} (k_B T)^{\mu'} E_F^{p-\mu'} (2^{\mu'} - 2) \pi^{\mu'}}{m+l+1} B_{(1/2)\mu} \right]. \end{aligned} \quad (\text{VI. 14})$$

Contribution de spin à la conductivité transversale :

$$\begin{aligned} \sigma_{xx, \text{spin}}^{(2)}(T, \varrho, H) &\approx \left(\frac{g^* \mu_B^* H}{2\sigma}\right)^2 X_1 \times \\ &\times \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{m! l!} \left[\delta_1 \sum_{\mu=0,2,\dots}^{p=2m+2l} \frac{C_p^\mu (k_B T)^\mu E_F^{p-\mu} (2^\mu - 2) \pi^\mu}{\sigma^{2m+2l}} B_{(1/2)\mu} + \right. \\ &\left. + \delta_2 \sum_{\mu=0,2,\dots}^{p=2m+2l+1} \frac{C_p^\mu (k_B T)^\mu E_F^{p-\mu} (2^\mu - 2) \pi^\mu}{\sigma^{2m+2l+1}} B_{(1/2)\mu} \right]. \end{aligned} \quad (\text{VI. 15})$$

On remarque que le coefficient σ et l'énergie de Fermi E_F dépendent non seulement de dopage ϱ et de température T mais aussi de champ magnétique H . Cette dépendance de H vis-à-vis de σ et E_F a été étudiée dans le chapitre III, d'après les relations :

$$E_F \approx E_0 + 0.26 \frac{(\mu_B^* H)^2}{\sigma} - 0.80 \left(\frac{g^* \mu_B^* H}{2\sigma} \right)^2 \frac{1}{\sigma},$$

et

$$\sigma^{(0,0,2)}(\varrho, H) \approx \frac{\varrho^{4/9} e^{4/3}}{(\varepsilon)^{2/3}} \left(\frac{\pi}{16P} \right)^{2/9} \left\{ 1 - 0.04 \left(\frac{\mu_B^* H}{\sigma} \right)^2 - 0.17 \left(\frac{g^* \mu_B^* H}{2\sigma} \right)^2 \right\}.$$

En remplaçant ces quantités E_F et σ dans les formules (VI.13), (VI.14), (VI.15), et se limitant au second ordre en H , on obtient l'expression suivante de la conductivité transversale σ_{xx} :

$$\sigma_{xx}^{(0,0,2)} \approx \sigma_{xx}^{(0,0,0)} \left\{ 1 - 0.962 \left(\frac{\mu_B^* H}{\sigma} \right)^2 + 2.130 \left(\frac{g^* \mu_B^* H}{2 \sigma} \right)^2 \right\} , \quad (\text{VI. 16})$$

avec

$$\frac{1}{\sigma_{xx}^{(0,0,0)}} = \varrho_{xx}^{(0,0,0)} = \frac{\Gamma(\frac{3}{4}) \Gamma(\frac{1}{4}) \pi^2 \hbar^2 \varrho^{-2/9}}{2.901 \Gamma(\frac{1}{2}) e^2 \sqrt{m^* A}} .$$

Appliquant le même procédé , on trouve que la conductivité longitudinale σ_{zz} est donnée par

$$\sigma_{zz}^{(0,0,2)} \approx \sigma_{zz}^{(0,0,0)} \left\{ 1 - 0.920 \left(\frac{\mu_B^* H}{\sigma} \right)^2 + 3.754 \left(\frac{g^* \mu_B^* H}{2 \sigma} \right)^2 \right\} , \quad (\text{VI. 17})$$

avec

$$\frac{1}{\sigma_{zz}^{(0,0,0)}} = \varrho_{zz}^{(0,0,0)} = \frac{\Gamma(\frac{3}{4}) \Gamma(\frac{5}{4}) \pi^2 \hbar^2 \varrho^{-2/9}}{0.840 \Gamma(\frac{3}{2}) e^2 \sqrt{m^* A}} .$$

C - Magnétorésistance ordinaire .

Nous avons montré [31, 32] que , dans un faible champ magnétique , les composantes de la magnétorésistance sont liées aux coefficients du transport (cf. Appendice A) par les relations :

$$\varrho_{xx}(H) = \frac{1}{L_0^{(1)}} - \frac{L_{xxx}^{(1)} L_0^{(1)} + [L_{xyz}^{(1)}]^2}{[L_0^{(1)}]^3} H^2 , \quad (\text{VI. 18})$$

$$\varrho_{zz}(H) = \frac{1}{L_0^{(1)}} - \frac{L_{zzz}^{(1)} L_0^{(1)} + [L_{xyz}^{(1)}]^2}{[L_0^{(1)}]^3} H^2 , \quad (\text{VI. 19})$$

où

$$L_{xxx}^{(i)} = \frac{\partial L_{xx}^{(i)}}{\partial (H^2)} , \quad L_{zzz}^{(i)} = \frac{\partial L_{zz}^{(i)}}{\partial (H^2)} , \quad L_{xyz}^{(i)} = \frac{\partial L_{xy}^{(i)}}{\partial H} ,$$

et

$$L_{\alpha\beta}^{(1)}(T, \varrho, H) = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_{\alpha\beta}(E, \varrho, H) \left\{ - \frac{\partial f(E)}{\partial E} \right\} dE .$$

En pratique , les quantités $(L_{xxzz}^{(1)}/L_o^{(1)})$ et $(L_{zzzz}^{(1)}/L_o^{(1)})$ sont très grandes par rapport à $(L_{xyz}^{(1)}/L_o^{(1)})^2$, comme on le voit en faisant une application numérique (cf. Discussion) . Donc ,

$$\varrho_{xx}(H) \approx \frac{1}{L_o^{(1)}} - \frac{L_{xxzz}^{(1)}}{[L_o^{(1)}]^2} H^2 \quad \text{et} \quad \varrho_{zz}(H) \approx \frac{1}{L_o^{(1)}} - \frac{L_{zzzz}^{(1)}}{[L_o^{(1)}]^2} H^2 .$$

La magnétorésistance transversale et longitudinale est alors donnée approximativement par les formules :

$$\frac{\Delta \varrho_{xx}}{\varrho_{xx}^{(0,0,0)}} \approx + 0.962 \left(\frac{\mu_B^* H}{\sigma} \right)^2 - 2.130 \left(\frac{g^* \mu_B^* H}{2 \sigma} \right)^2 \quad (\text{VI. 20})$$

et

$$\frac{\Delta \varrho_{zz}}{\varrho_{zz}^{(0,0,0)}} \approx + 0.920 \left(\frac{\mu_B^* H}{\sigma} \right)^2 - 3.754 \left(\frac{g^* \mu_B^* H}{2 \sigma} \right)^2 , \quad (\text{VI. 21})$$

On a $\varrho_{xx}^{(0,0,0)} \approx \varrho_{zz}^{(0,0,0)} \approx \varrho_o^{(0,0,0)}$, où $\varrho_o^{(0,0,0)}$ est la résistivité électrique calculée dans le chapitre V . Un calcul exact des composantes transversale et longitudinale de la magnétorésistance sans aucune approximation aurait donné des valeurs identiques à ϱ_o .

D - Discussion .

Comme dans les chapitres précédents nous considérons deux cas typiques .

D.1 - Cas où $n_o = \varrho - n_a$.

(i) Semi-conducteur non compensé . Nous nous plaçons d'abord dans l'approximation de Thomas-Fermi avec un effet d'écran uniquement dû aux électrons ($L = L_e$) . On obtient alors :

$$\left(\frac{\Delta \varrho_o}{\varrho_o^{(0,0,0)}} \right)_{xx} \approx \left\{ 0.962 - 2.130 \left(\frac{g^*}{2} \right)^2 \right\} \left(\frac{\mu_B^*}{A} \right)^2 \varrho^{-8/9} H^2 \quad (\text{VI. 22})$$

et

$$\left(\frac{\Delta \rho_0}{\rho_0^{(0,0,0)}} \right)_{\text{,,}} \approx \left\{ 0.920 - 3.754 \left(\frac{g^*}{2} \right)^2 \right\} \left(\frac{\mu_B^*}{A} \right)^2 e^{-8/9} H^2, \quad (\text{VI. 23})$$

Dans les expressions (VI. 22) et (VI. 23) , les premier et second termes représentent la contribution du mouvement orbital et de spin . Nous pouvons conclure que , pour une densité d'impuretés donnée ou d'électrons , la partie orbitale de la magnétorésistance est proportionnelle au carré du champ magnétique , en accord avec le résultat récent de Fukuyama et ses collaborateurs [27] ; pour un champ magnétique donné , dans cette approximation , la magnétorésistance orbitale est proportionnelle à la puissance -8/9 de la densité d'impuretés . La même conclusion est obtenue pour la contribution de spin . La magnétorésistance ordinaire est tantôt positive et tantôt négative ; elle est positive si la contribution dominante est la contribution orbitale , négative si c'est la contribution de spin . Cette dernière est généralement plus petite que la contribution orbitale dans un semi-conducteur usuel où la masse effective est petite .

Par exemple , nous considérons le cas de germanium dans lequel les surfaces d'énergie constante sont des ellipsoïdes localisés dans des positions équivalentes de la zone de Brillouin . La masse effective pour chaque ellipsoïde est un tenseur avec les composantes indépendantes $m_{\parallel}^*$ et $m_{\perp}^*$. Si H fait un angle avec l'axe majeur d'un ellipsoïde , la masse effective de résonance cyclotronique est donnée par

$$\left(\frac{1}{m_c^*} \right)^2 = \frac{\cos^2 \theta'}{(m_{\perp}^*)^2} + \frac{\sin^2 \theta'}{m_{\parallel}^* m_{\perp}^*},$$

où $m_{\parallel}^* = 1.64 m_0$ et $m_{\perp}^* = 0.082 m_0$.

Nous devons évaluer μ_B^* et g^* , avec

$$\mu_B^* = \frac{e \hbar}{2 m_c^* c}, \quad g^* = \left(\frac{m_c^*}{m_0} \right) g, \quad \text{et} \quad g^* \mu_B^* = \frac{e \hbar g}{2 m_0 c}.$$

Nous considérons deux exemples :

- a) Si les directions des vecteurs courant $\vec{j}$ et champ magnétique $\vec{H}$ correspondent aux axes cristallographiques (110) et (001) respectivement, on trouve la même masse effective pour les huit ellipsoïdes équivalents. Dans ce cas : $\cos^2 \theta' = 1/3$. Donc, $m_c^* = 0.14 m_o$.
- b) Si les directions des vecteurs courant $\vec{j}$ et champ magnétique $\vec{H}$ correspondent l'une à l'autre à l'axe (110), on trouve :

-pour quatre ellipsoïdes : $\cos^2 \theta' = 0$, $(1/m_c^*)^2 = 7.46/m_o^2$,

-pour les quatre autres : $\cos^2 \theta' = 2/3$, $(1/m_c^*)^2 = 102.48/m_o^2$.

Pour évaluer μ_B^* dans les formules (VI.22) et (VI.23), nous devons prendre la moyenne des valeurs de $(1/m_c^*)^2$; nous obtenons la même masse effective équivalente que dans le cas a), à savoir $m_c^* = 0.14 m_o$.

Par exemple, nous calculons la magnétorésistance ordinaire pour n-Ge avec $\xi=16$ et $\rho = 3.34 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Les constantes A et P contiennent la masse effective de densité d'états, $m_d^* = (m_{//}^* m_{\perp}^2)^{1/3} = 0.22 m_o$. En unités cgs, $A = 13.42 \times 10^{-23}$ et $P = 5 \times 10^{75/2}$ et

$$\left(\frac{\Delta \rho_0}{\rho_0^{(0,0,0)}} \right)_{xx, \text{orb}} = 10.20 \times 10^{-12} H^2, \quad \left(\frac{\Delta \rho_0}{\rho_0^{(0,0,0)}} \right)_{xx, \text{spin}} = -0.40 \times 10^{-12} H^2,$$

$$\left(\frac{\Delta \rho_0}{\rho_0^{(0,0,0)}} \right)_{zz, \text{orb}} = 9.74 \times 10^{-12} H^2, \quad \left(\frac{\Delta \rho_0}{\rho_0^{(0,0,0)}} \right)_{zz, \text{spin}} = -0.77 \times 10^{-12} H^2.$$

On obtient, dans cette approximation, une magnétorésistance positive pour les composantes transversale et longitudinale. Pour comparer ces résultats avec les expériences de Furukawa [11] concernant la magnétorésistance ordinaire du germanium dopé à l'arsenic à une température 4.2°K , on a établi le tableau 19.

Tableau 19 - Magnétorésistance ordinaire de n-Ge à 4.2°K .

$(1/H^2)(\Delta \rho / \rho)$	composante transversale	composante longitudinale	valeur moyenne
résultats calculés (10^{-12} cgs)	9.80	8.97	9.39
résultats expérimentaux (10^{-12} cgs)	3.80	15.30	9.55

On voit que la valeur moyenne de la magnétorésistance ordinaire est en bon accord avec la moyenne des résultats expérimentaux . Nous admettons que seules les valeurs moyennes sont significatives car , dans notre travail , il n'a pas été complètement tenu compte de l'anisotropie .

D'autre part , pour $\rho = 3.34 \times 10^{-18} \text{ cm}^{-3}$, $(L_{xyz}^{(1)} / L_o^{(1)})^2 = 0.11 \cdot 10^{-12}$ unités cgs (cf. le chapitre V) . Cette valeur est négligeable vis-à-vis de $L_{xxzz}^{(1)} / L_o^{(1)} = \Delta \rho_{xx} / H^2 \rho_{xx} = 9.80 \times 10^{-12}$ unités cgs et de $L_{zzzz}^{(1)} / L_o^{(1)} = \Delta \rho_{zz} / H^2 \rho_{zz} = 8.97 \times 10^{-12}$ unités cgs .

Nous calculons maintenant quelques valeurs de $(1/H^2)(\Delta \rho / \rho)$ correspondant aux densités d'impuretés : 10^{18} , 1.9×10^{18} et $4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (cf. les tableaux 20 à 23) .

Tableau 20 - Magnétorésistance ordinaire en fonction de ρ dans le cas où $L = L_e$.

$\rho \text{ (cm}^{-3} \text{)}$	10^{18}	1.9×10^{18}	4×10^{18}
$(1/H^2)(\Delta \rho_{xx} / \rho_{xx}) (10^{-12} \text{ cgs})$	28.67	16.57	8.35
$(1/H^2)(\Delta \rho_{zz} / \rho_{zz}) (10^{-12} \text{ cgs})$	26.25	15.16	7.64

Le tableau 20 correspond au cas d'un effet d'écran purement électronique.

En présence des ions positifs (donneurs ionisés) , en introduisant l'effet d'écran dû aux ions et la longueur d'écran global L telle que $1/L = 1/L_i + 1/L_e$, on trouve les résultats du tableau 21 .

Tableau 21 - Magnétorésistance ordinaire en fonction de ρ dans le cas où $1/L = 1/L_i + 1/L_e$.

$\rho \text{ (cm}^{-3} \text{)}$	10^{18}	1.9×10^{18}	4×10^{18}
$(1/H^2)(\Delta \rho_{xx} / \rho_{xx}) (10^{-12} \text{ cgs})$	38.33	22.18	12.13
$(1/H^2)(\Delta \rho_{zz} / \rho_{zz}) 10^{-12} \text{ cgs}$	35.08	20.30	11.10

(ii) Cas où il y a compensation partielle : degré de compensation $n_a / \rho = 1/2$.

Les tableaux 22 et 23 donnent les résultats .

Tableau 22 . Magnétorésistance ordinaire en fonction de ρ dans le cas où $L = L_e$ avec $n_a = 0.5 \rho$.

ρ (cm ⁻³)	10^{18}	1.9×10^{18}	4×10^{18}	3.27×10^{19}
$(1/H^2)(\Delta \rho_{xx}/\rho_{xx})(10^{-12} \text{ cgs})$	19.91	11.49	5.80	0.90
$(1/H^2)(\Delta \rho_{zz}/\rho_{zz})(10^{-12} \text{ cgs})$	18.22	10.52	5.31	0.83

Tableau 23 - Magnétorésistance ordinaire en fonction de ρ dans le cas où $1/L = 1/L_i + 1/L_e$ avec $n_a = 0.5 \rho$.

ρ (cm ⁻³)	10^{18}	1.9×10^{18}	4×10^{18}	3.27×10^{19}
$(1/H^2)(\Delta \rho_{xx}/\rho_{xx})(10^{-12} \text{ cgs})$	29.62	15.87	9.20	1.66
$(1/H^2)(\Delta \rho_{zz}/\rho_{zz})(10^{-12} \text{ cgs})$	27.11	14.52	8.42	1.52

Ces résultats sont résumés sur les figures 17 et 18 .

D.2 - Cas où $n_o = \beta \rho^{1/3} - n_a$.

Nous allons raisonner , comme dans les chapitres précédents , sur n-GaAs non compensé .

Dans l'approximation où $L = L_e$, la magnétorésistance ordinaire est donnée par

$$\left(\frac{\Delta \rho_0}{\rho_0^{(0,0,0)}} \right)_{xx} \approx \left\{ 0.962 - 2.130 \left(\frac{g^*}{2} \right)^2 \right\} \left(\frac{\mu_B^*}{A} \right)^2 \left(\frac{n_0}{\beta} \right)^{-8/3} H^2 \quad (\text{VI. 24})$$

et

$$\left(\frac{\Delta \rho_0}{\rho_0^{(0,0,0)}} \right)_{zz} \approx \left\{ 0.920 - 3.754 \left(\frac{g^*}{2} \right)^2 \right\} \left(\frac{\mu_B^*}{A} \right)^2 \left(\frac{n_0}{\beta} \right)^{-8/3} H^2 . \quad (\text{VI. 25})$$

Elle est ici proportionnelle à la puissance $-8/3$ de la densité des électrons , pour un champ magnétique donné (cf. Tableau 24) .

Tableau 24 - Magnétorésistance ordinaire en fonction de ρ dans le cas où $L = L_e$.

$\rho \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	$8,10^{18}$	$1,89,10^{19}$	$6,4,10^{19}$	10^{20}
$(1 \text{ H}^{-2})(\Delta \rho_{xx} - \rho_{xx})(10^{-12} \text{ cgs})$	46.85	22.83	7.33	4.44
$(1 \text{ H}^{-2})(\Delta \rho_{zz} - \rho_{zz})(10^{-12} \text{ cgs})$	43.86	22.44	6.90	4.33

En introduisant la longueur d'écran global L , on trouve les résultats du tableau 25.

Tableau 25 - Magnétoresistance ordinaire en fonction de ρ dans le cas où $L = 1 L_i + 1 L_e$.

$\rho \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	$8,10^{18}$	$1,89,10^{19}$	$6,4,10^{19}$	10^{20}
$(1 \text{ H}^{-2})(\Delta \rho_{xx} - \rho_{xx})(10^{-12} \text{ cgs})$	85.06	48.89	17.07	12.43
$(1 \text{ H}^{-2})(\Delta \rho_{zz} - \rho_{zz})(10^{-12} \text{ cgs})$	79.64	42.83	15.93	11.43

Ces résultats sont représentés sur les figures 19 et 20.

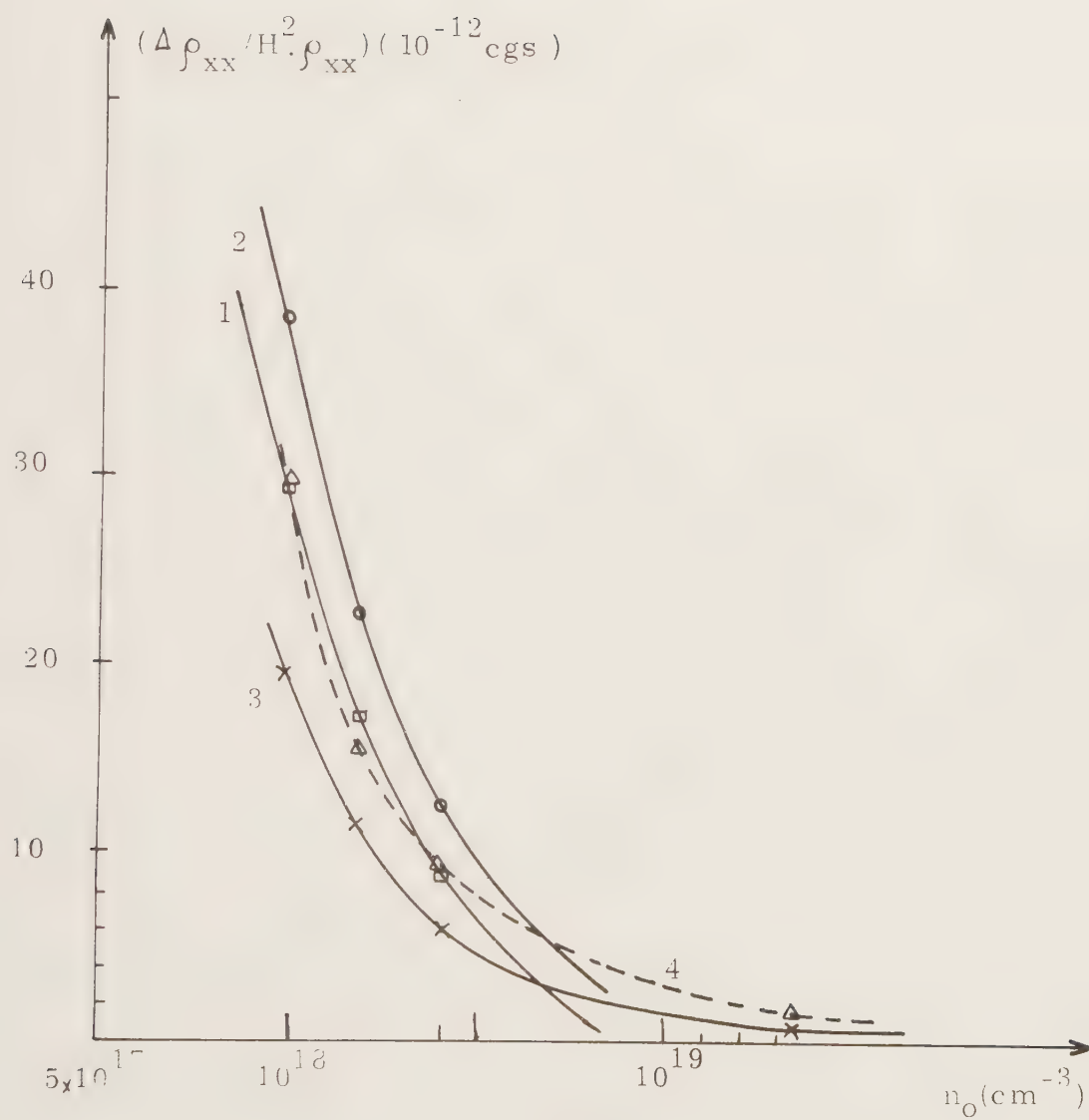


Fig. 17

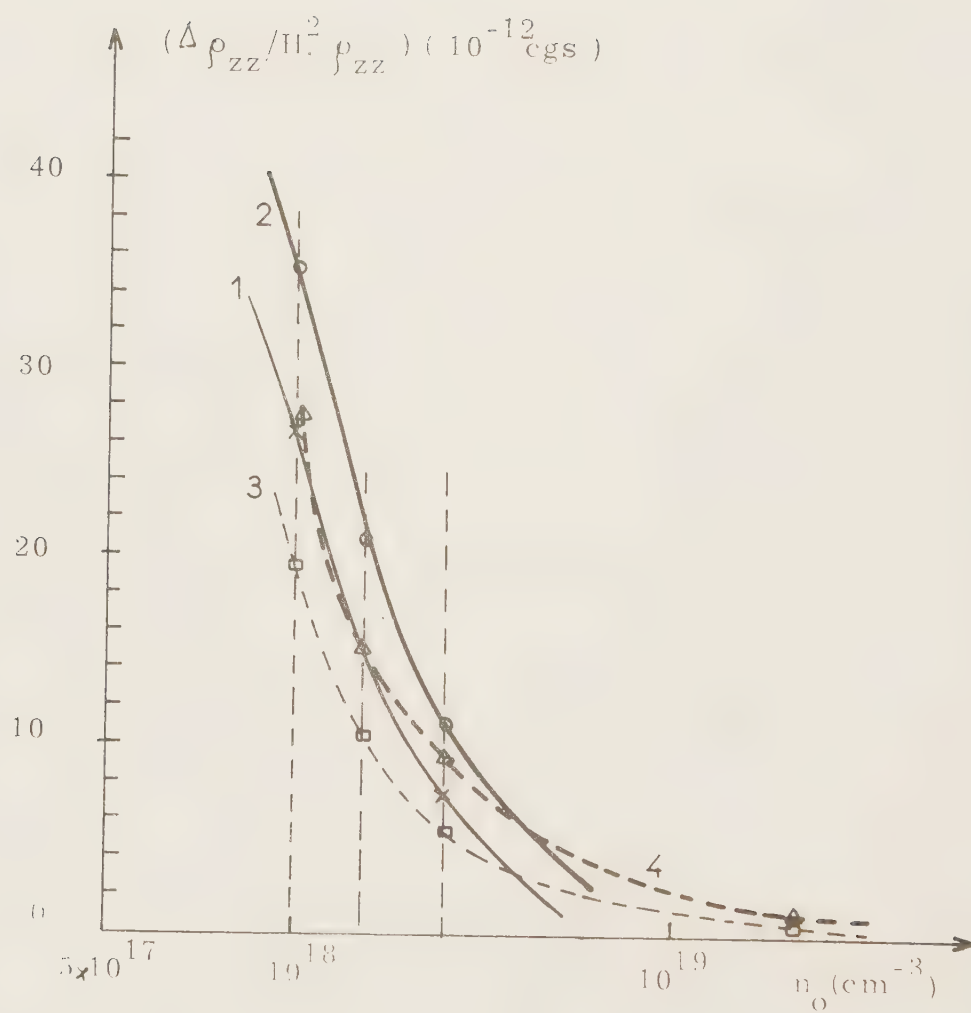


Fig. 18

$$(\Delta \rho_{xx} / H^2 \cdot \rho_{xx}) (10^{-12} \text{ cgs})$$

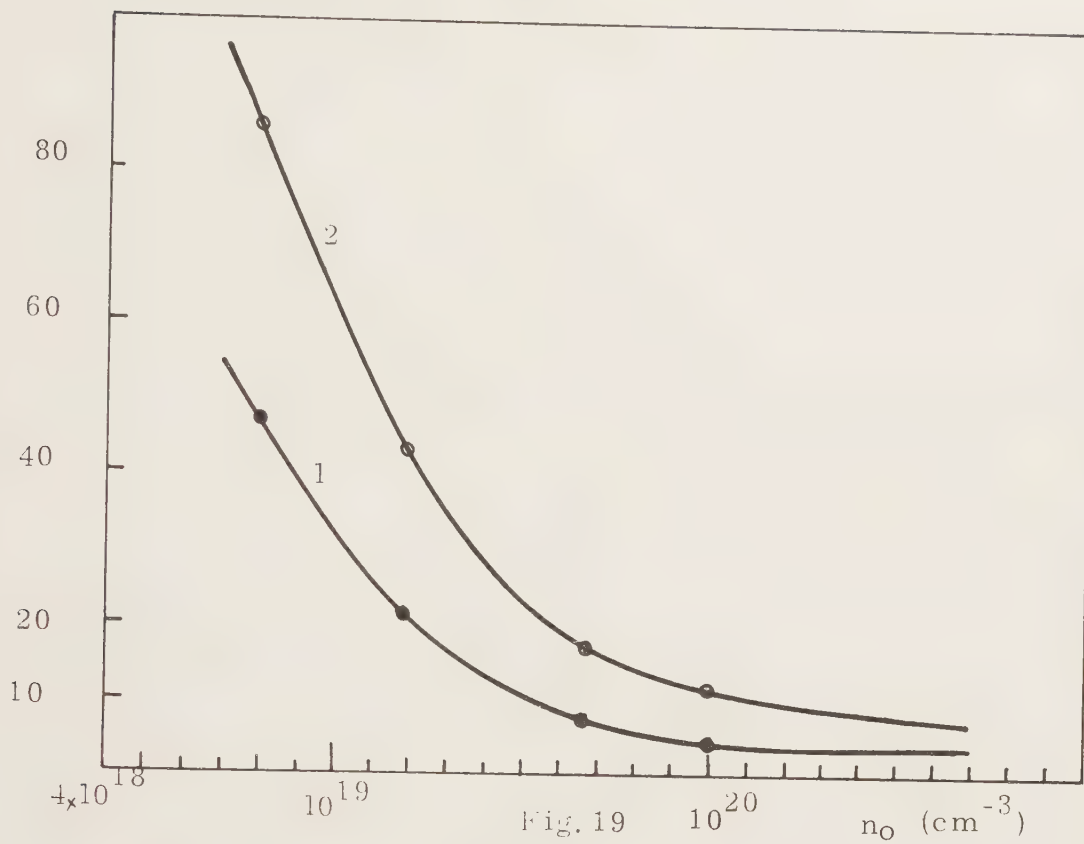


Fig. 19

$$(\Delta \rho_{zz} / H^2 \cdot \rho_{zz}) (10^{-12} \text{ cgs})$$

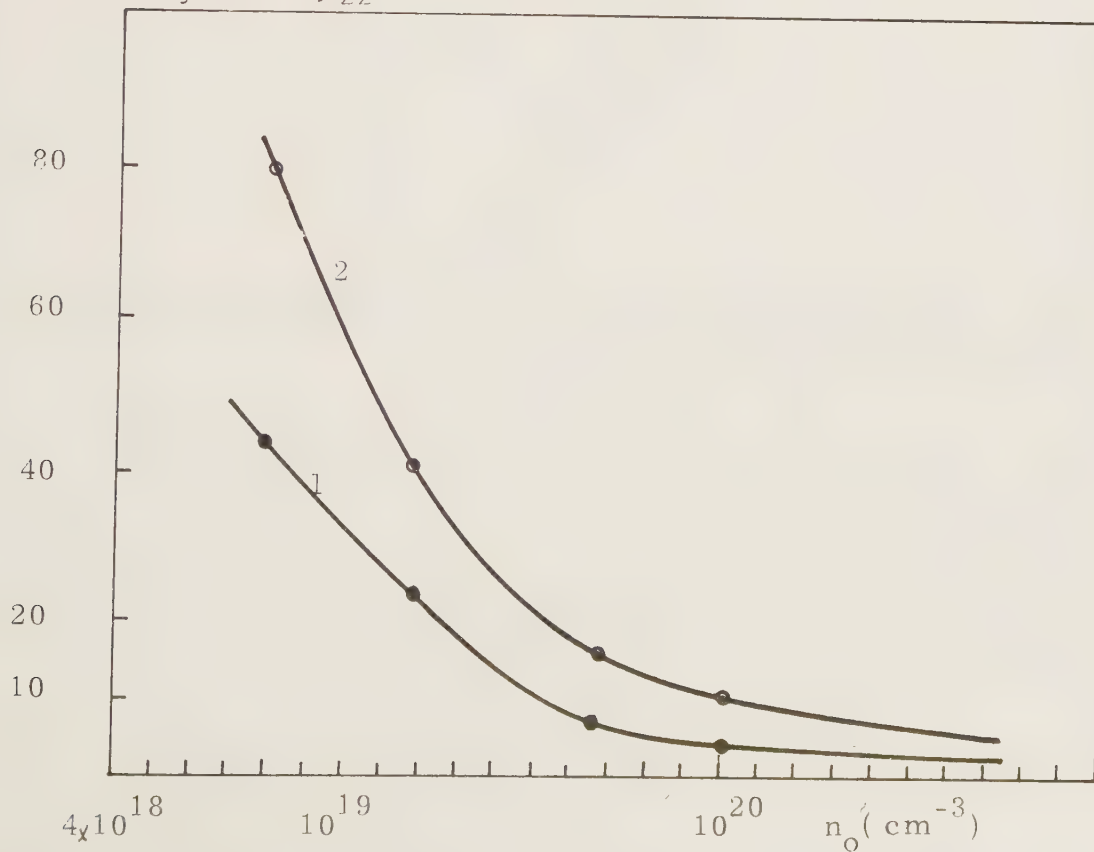


Fig. 20

VII . Effets thermoélectriques

A - Description générale .

Les effets thermoélectriques sont définis dans un champ magnétique nul . Pour un milieu isotrope , les coefficients de transport électronique dans un champ magnétique nul sont calculés à partir des équations phénoménologiques suivantes (cf. Appendice A)

$$\nabla (E_F/e) = \rho_0 \vec{j} + Q \nabla T , \quad (\text{VII.1})$$

$$\vec{j}^Q = T Q \vec{j} - \kappa \nabla T . \quad (\text{VII.2})$$

Dans ces formules , $\vec{j}$ et $\vec{j}^Q$ sont respectivement les vecteurs courant électronique et courant thermique , ρ_0 , Q et κ , la résistivité électrique , le coefficient thermoélectrique absolu et la conductivité thermique , et ∇ représente le gradient .

Les effets thermoélectriques sont déterminés de la façon suivante .

A.1 - Effet Seebeck . Une force électromotrice est produite par un gradient de température à courant électrique nul ($\vec{j} = 0$) :

$$\nabla (E_F/e) = Q(T) \nabla T . \quad (\text{VII.3})$$

Cet effet est complètement défini par le coefficient thermoélectrique Q (appelé coefficient de Seebeck) . En pratique , on mesure le potentiel de Seebeck donné par

$$V_s(T, T_0) = \int_{T_0}^T Q(T) dT .$$

A.2 - Effet Peltier . Un courant de chaleur est produit à température uniforme ($\nabla T = 0$) par le passage d'un courant électrique :

$$\vec{j}^Q = T Q \vec{j} ; \quad (\text{VII.4})$$

$T Q = - \mathcal{P}$ est le coefficient de Peltier ; cette relation est dite "première relation de Kelvin" .

A.3 - Effet Thomson . Dans un régime continu , l'énergie est dissipée avec un taux donné par

$$\begin{aligned}
 - \nabla \cdot \vec{j}_d &= - \nabla \cdot (- E_F \vec{j}/e + \vec{j} Q) \\
 &= \vec{j} \cdot \nabla (E_F/e) + (E_F \nabla \cdot \vec{j})/e - \nabla \cdot \vec{j} Q
 \end{aligned}$$

Mais dans le régime continu , $\nabla \cdot \vec{j} = 0$. Introduisant les valeurs de $\nabla (E_F/e)$ et $\vec{j} Q$ dans cette expression , on obtient

$$\begin{aligned}
 - \nabla \cdot \vec{j}_d &= \rho_0 j^2 + Q \vec{j} \cdot \nabla T - \nabla \cdot T Q \vec{j} + \nabla \cdot (\chi \nabla T) \\
 &= \rho_0 j^2 + \nabla \cdot (\chi \nabla T) - T \vec{j} \cdot \nabla Q
 \end{aligned}$$

On remarque que Q dépend de la position car Q dépend de la température T et cette dernière dépend de la position . On peut écrire encore :

$$- \nabla \cdot \vec{j}_d = \rho_0 j^2 + \nabla \cdot (\chi \nabla T) - T (dQ/dT) \vec{j} \cdot \nabla T , \quad (\text{VII. 5})$$

où le premier terme représente le taux de production de la chaleur (effet Joule) dans l'unité de volume ; le second terme est le taux d'écoulement de la chaleur par unité de section par la conduction thermique ordinaire ; le dernier terme , appelé chaleur de Thomson , traduit le couplage entre phénomènes électriques et thermiques .

On note que ces effets thermoélectriques dans un champ magnétique nul sont tous complètement déterminés à partir du coefficient thermoélectrique Q . Une étude théorique de ces effets se ramène donc au calcul de ce coefficient ; d'autre part , il est intéressant d'étudier en même temps la conductivité thermique χ des électrons à partir des équations (VII. 1) et (VII. 2) (cf. Appendice A) .

B - Conductivité thermique et coefficient thermoélectrique

On peut écrire :

$$\sigma_0(T, \varrho) = L^{(1)} , \quad (\text{VII. 6})$$

$$\chi(T, \varrho) = \frac{1}{T} \left\{ L^{(4)} - \frac{[L^{(2)}]^2}{L^{(1)}} \right\} , \quad (\text{VII. 7})$$

$$Q(T, \varrho) = \frac{1}{T} \left\{ \frac{L^{(2)}}{L^{(1)}} + \frac{E_F}{e} \right\} , \quad (\text{VII. 8})$$

où σ_0 est la conductivité électronique déjà étudiée dans le chapitre V et où les coefficients $L^{(i)}$ sont des coefficients de transport électronique donnés, dans un système isotrope, par les relations :

$$L^{(1)} = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_0(E, \varrho) \left\{ -\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right\} dE, \quad (\text{VII. 9})$$

$$L^{(2)} = L^{(3)} = -\frac{1}{e} \int_{-\infty}^{\infty} E \Phi_0(E, \varrho) \left\{ -\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right\} dE, \quad (\text{VII. 10})$$

$$L^{(4)} = \frac{1}{e^2} \int_{-\infty}^{\infty} E^2 \Phi_0(E, \varrho) \left\{ -\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right\} dE. \quad (\text{VII. 11})$$

Dans ces équations, $\Phi_0(E, \varrho)$ est la fonction de l'énergie E et du dopage ϱ déjà utilisée au chapitre V ; $L^{(2)} = L^{(3)}$ est la relation d'Onsager (cf. Appendice A).

On a

$$\Phi_0(E, \varrho) = X \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{m! l!} \left\{ \delta_1 \left(\frac{E}{\sigma} \right)^{2(m+l)} + \delta_2 \left(\frac{E}{\sigma} \right)^{2(m+l)-1} \right\}, \quad (\text{VII. 12})$$

avec

$$X = \frac{\Gamma(\frac{5}{2}) e^2 \sqrt{m^* \sigma}}{3 \pi^2 \Gamma(\frac{7}{4}) \Gamma(\frac{5}{4}) \hbar^2},$$

$$\delta_1 = \frac{[\Gamma(\frac{1}{2})]^2 \Gamma(m + \frac{5}{4})}{\Gamma(m + \frac{1}{2})} \quad \text{et} \quad \delta_2 = \frac{2 \sqrt{\pi} \Gamma(\frac{3}{2}) \Gamma(m + \frac{7}{4})}{\Gamma(m + \frac{3}{2})}.$$

On en tire :

$$L^{(2)} = L^{(3)} = -\frac{X \sigma}{e} \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{m! l!} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \delta_1 \left(\frac{E}{\sigma} \right)^{2(m+l)+1} + \delta_2 \left(\frac{E}{\sigma} \right)^{2(m+l)+2} \right\} \left\{ -\frac{\partial f}{\partial E} \right\} dE, \quad (\text{VII. 13})$$

$$L^{(4)} = \frac{X \sigma^2}{e^2} \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{m! l!} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \delta_1 \left(\frac{E}{\sigma} \right)^{2(m+l)+2} + \delta_2 \left(\frac{E}{\sigma} \right)^{2(m+l)+3} \right\} \left\{ -\frac{\partial f}{\partial E} \right\} dE. \quad (\text{VII. 14})$$

Remarquant , comme dans les chapitres précédents que , pour les basses températures

$$\int_{-\infty}^{\infty} E^{\varrho} \left\{ -\frac{\partial f}{\partial E} \right\} dE = \sum_{\mu=0,2,\dots} C_{\varrho}^{\mu}(k_B T)^{\mu} \frac{E_F^{\varrho-\mu}}{\sigma^{\varrho}} (2^{\mu} - 2) \pi^{\mu} B_{1/2\mu},$$

on obtient [30]

$$L^{(2)} = -\frac{X\sigma}{e} \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{m!l!} \left\{ \delta_1 \sum_{\mu=0,2,\dots}^{\varrho=2(m+l)+1} C_{\varrho}^{\mu}(k_B T)^{\mu} \frac{E_F^{\varrho-\mu}}{\sigma^{\varrho}} (2^{\mu} - 2) \pi^{\mu} B_{1/2\mu} + \right. \\ \left. + \delta_2 \sum_{\mu'=0,2,\dots}^{\varrho'=2(m+l)+2} C_{\varrho'}^{\mu'}(k_B T)^{\mu'} \frac{E_F^{\varrho'-\mu'}}{\sigma^{\varrho'}} (2^{\mu'} - 2) \pi^{\mu'} B_{1/2\mu'} \right\}, \quad (\text{VII. 15})$$

$$L^{(4)} = \frac{X\sigma^2}{e^2} \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{m!l!} \left\{ \delta_1 \sum_{\mu=0,2,\dots}^{\varrho=2(m+l)+2} C_{\varrho}^{\mu}(k_B T)^{\mu} \frac{E_F^{\varrho-\mu}}{\sigma^{\varrho}} (2^{\mu} - 2) \pi^{\mu} B_{1/2\mu} + \right. \\ \left. + \delta_2 \sum_{\mu'=0,2,\dots}^{\varrho'=2(m+l)+3} C_{\varrho'}^{\mu'}(k_B T)^{\mu'} \frac{E_F^{\varrho'-\mu'}}{\sigma^{\varrho'}} (2^{\mu'} - 2) \pi^{\mu'} B_{1/2\mu'} \right\}. \quad (\text{VII. 16})$$

Replaçant E_F par sa valeur dans un champ magnétique nul , déduite de l'expression (III. 13) , on trouve , en explicitant seulement les premiers termes ,

$$L^{(1)} = 1.61 X \left\{ 1 + 2.02 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + 1.49 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^2 + \right. \\ \left. + 0.33 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^3 + \dots - 0.04 \left(\frac{\pi k_B T}{\sigma} \right)^2 + 0.05 \left(\frac{\pi k_B T}{\sigma} \right)^2 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + \dots \right\}, \quad (\text{VII. 17})$$

$$L^{(2)} = -\frac{X\sigma}{e} \left\{ 1.61 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + 3.26 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^2 + \right. \\ \left. + 2.40 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^3 + \dots - 0.08 \left(\frac{\pi k_B T}{\sigma} \right)^2 + 1.09 \left(\frac{\pi k_B T}{\sigma} \right)^2 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + \dots \right\}, \quad (\text{VII. 18})$$

et

$$L^{(4)} = \frac{X\sigma^2}{e^2} \left\{ 1.61 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^2 + 3.26 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^3 + 2.40 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^4 + \dots + 0.54 \left(\frac{\pi k_B T}{\sigma} \right)^2 + \right. \\ \left. + 2.42 \left(\frac{\pi k_B T}{\sigma} \right)^2 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + 3.03 \left(\frac{\pi k_B T}{\sigma} \right)^2 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^2 + 0.38 \left(\frac{\pi k_B T}{\sigma} \right)^4 + \dots \right\}. \quad (\text{VII. 19})$$

où E_0 est l'énergie de Fermi au zéro absolu .

En utilisant les formules (VII. 7) , (VII. 8) , (VII. 17) , (VII. 18) et (VII. 19) , on obtient :

$$\begin{aligned} \kappa(T, \varrho) = 0.99 \left(\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3 e^2} \right) \sigma_0^{(0,0)} \left\{ 1 + 4.62 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + \right. \\ \left. + 0.75 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^2 + \dots + 0.72 \left(\frac{\pi k_B T}{\sigma} \right)^2 + \dots \right\}, \end{aligned} \quad (\text{VII. 20})$$

$$\begin{aligned} Q(T, \varrho) = -0.621 \left(\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3 e \sigma^{(0,0)}} \right) \left\{ 1 - 4.10 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) - \right. \\ \left. - 1.66 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right)^2 + \dots - 0.05 \left(\frac{\pi k_B T}{\sigma} \right)^2 + \dots \right\}, \end{aligned} \quad (\text{VII. 21})$$

où $\sigma_0^{(0,0)}$ et $\sigma^{(0,0)}$ sont respectivement la conductivité électronique et le coefficient caractérisant les impuretés , déjà explicités dans les chapitres V et III .

C - Discussion .

Comme dans les autres chapitres , nous considérons deux cas typiques .

C.1 - Cas où $n_0 = \rho - n_a$.

Considérons d'abord le cas où $L = L_e$. Nous supposons , pour simplifier , que $|E_0/\sigma|$ est suffisamment petit par rapport à l'unité , c'est-à-dire

$$\varrho \ll (1 + \theta)^3 \left| \frac{m^*}{(m_0 \varepsilon)} \right|^3 \times 5 \times 10^{25} \text{ cm}^{-3} ,$$

et que la température est suffisamment basse , de sorte que l'approximation d'ordre (0, 0) puisse être adoptée . On obtient , avec $n_a = 0$:

$$\kappa^{(0,0)}(T, \varrho) \approx \frac{\pi^2 k_B^2}{3 e^2} \varrho^{2/3} T , \quad (\text{VII. 22})$$

$$Q^{(0,0)}(T, \varrho) \approx -0.621 \frac{\pi^2 k_B^2}{3 e A} \varrho^{4/3} T . \quad (\text{VII. 23})$$

On conclut que , dans cette approximation , la conductivité thermique $\kappa^{(0,0)}$ est proportionnelle à la puissance $2/9$ de la densité des donneurs (ou des électrons) pour une température donnée et le coefficient thermo-électrique $Q^{(0,0)}$ à la puissance $-4/9$ de la densité des donneurs . D'autre part , le signe du coefficient thermoélectrique de la bande d'impuretés pour les semi-conducteurs de type n est toujours négatif comme pour les métaux [96] , où le coefficient thermoélectrique est négatif et approximativement proportionnel à la puissance $-6/9$ de la densité des électrons .

On sait que pour les métaux , la loi de Wiedemann-Franz est donnée par

$$\frac{\kappa_{\text{met}}}{T \sigma_{0,\text{met}}} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 = 2.45 \times 10^{-8} \text{ W}\Omega \text{ deg}^{-2} .$$

Cette valeur est la constante de Wiedemann-Franz L_0 . On trouve [30] que cette loi est aussi approximativement valable pour les semi-conducteurs très dopés de type n ; en effet, on a

$$\frac{\kappa^{(0,0)}}{T \sigma_0^{(0,0)}} = \frac{\kappa^{(0,0)}}{T C_1 \rho^{2/9}} \approx L_0 .$$

Par exemple , pour n-Ge non compensé , quelques résultats en fonction de ρ sont donnés dans le tableau 26 .

Tableau 26 - Conductivité thermique et coefficient thermoélectrique en fonction de ρ , calculés des expressions (VII. 20) et (VII. 21) .

$\rho \text{ (cm}^{-3} \text{)}$	10^{18}	1.9×10^{18}	4×10^{18}
$(\kappa/T)(\text{W deg}^{-2} \text{ cm}^{-1})$	0.65×10^{-6}	1.12×10^{-6}	1.91×10^{-6}
$-Q/T \text{ (V deg}^{-2} \text{)}$	2.30×10^{-6}	1.36×10^{-6}	0.59×10^{-6}

D'autre part , en introduisant la longueur d'écran global L , défini au chapitre III , on trouve les résultats du tableau 27 .

Tableau 27 - Conductivité thermique et coefficient thermoélectrique en fonction de ρ dans le cas où $1/L = 1/L_i + 1/L_e$.

$\rho \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	10^{18}	1.9×10^{18}	4×10^{18}
$(\kappa/T) \text{ (Wdeg}^{-2}\text{cm}^{-1}\text{)}$	0.61×10^{-6}	1.04×10^{-6}	1.73×10^{-6}
$-Q/T \text{ (Vdeg}^{-2}\text{)}$	2.66×10^{-6}	1.58×10^{-6}	0.71×10^{-6}

En présence des accepteurs avec $n_a = 0.5 \rho$, on obtient les résultats des tableaux 28 et 29.

Tableau 28 - Conductivité thermique et coefficient thermoélectrique en fonction de ρ dans le cas où $L = L_e$ avec $n_a = 0.5 \rho$.

$\rho \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	10^{18}	1.9×10^{18}	4×10^{18}
$(\kappa/T) \text{ (Wdeg}^{-2}\text{cm}^{-1}\text{)}$	0.03×10^{-6}	0.19×10^{-6}	0.56×10^{-6}
$-Q/T \text{ (Vdeg}^{-2}\text{)}$	2.73×10^{-6}	1.95×10^{-6}	1.23×10^{-6}

Tableau 29 - Conductivité thermique et coefficient thermoélectrique en fonction de ρ dans le cas où $1/L = 1/L_i + 1/L_e$ avec $n_a = 0.5 \rho$.

$\rho \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	10^{18}	1.9×10^{18}	4×10^{18}
$(\kappa/T) \text{ (Wdeg}^{-2}\text{cm}^{-1}\text{)}$	0.027×10^{-6}	0.178×10^{-6}	0.490×10^{-6}
$-Q/T \text{ (Vdeg}^{-2}\text{)}$	3.33×10^{-6}	2.29×10^{-6}	1.55×10^{-6}

Ces résultats sont résumés sur les figures 21 et 22.

C.2 - Cas où $n_o = \beta \rho^{1/3} - n_a$.

Ce cas [20, 21, 28 à 34], avec une densité totale des impuretés très élevée, applique notamment à GaAs de type n avec le sélénium comme impureté. Les tableaux 30 et 31 donnent les résultats en l'absence d'accepteurs.

Tableau 30 - Conductivité thermique et coefficient thermoélectrique en fonction de ρ , avec $L = L_e$.

$\rho \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	1.89×10^{19}	6.40×10^{19}	10^{20}
$(\kappa/T) \text{ (Wdeg}^{-2}\text{cm}^{-1}\text{)}$	2.07×10^{-6}	1.48×10^{-6}	1.22×10^{-6}
$-Q/T \text{ (Vdeg}^{-2}\text{)}$	0.38×10^{-6}	0.53×10^{-6}	0.51×10^{-6}

Tableau 31 - Conductivité thermique et coefficient thermoélectrique en fonction de ρ , avec $1/L = 1/L_i + 1/L_e$.

$\rho \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	1.89×10^{19}	6.40×10^{19}	10^{20}
$(\kappa/T) \text{ (Wdeg}^{-2}\text{cm}^{-1}\text{)}$	1.74×10^{-6}	1.40×10^{-6}	0.97×10^{-6}
$-Q/T \text{ (Vdeg}^{-2}\text{)}$	0.54×10^{-6}	0.81×10^{-6}	0.81×10^{-6}

Ces résultats sont représentés sur les figures 23 et 24 .

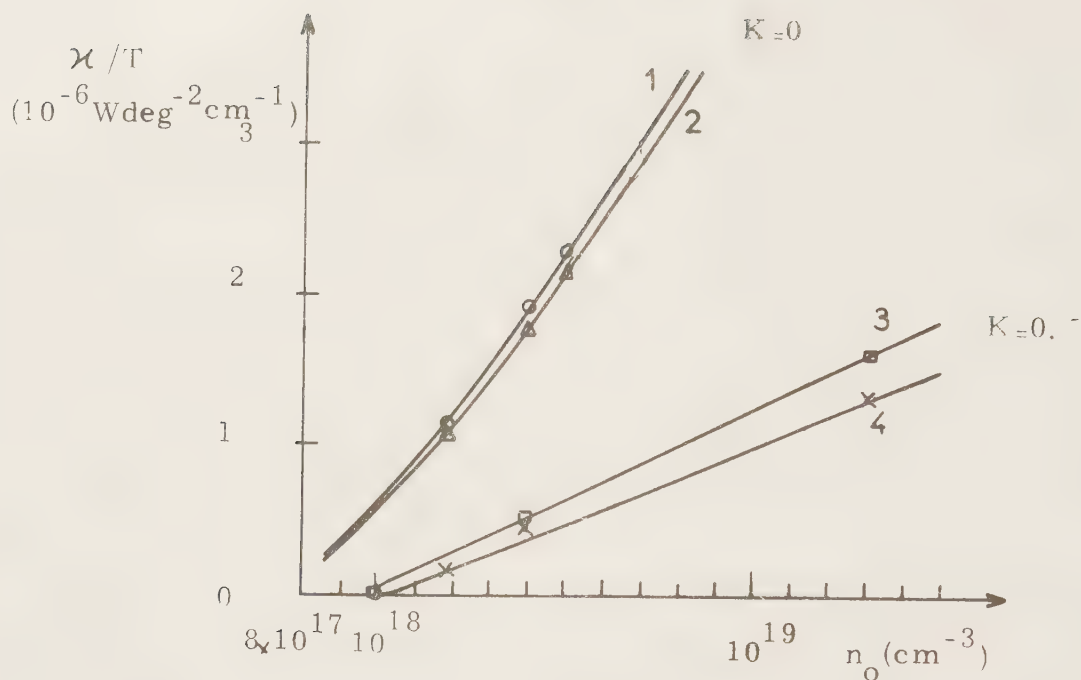


Fig. 21

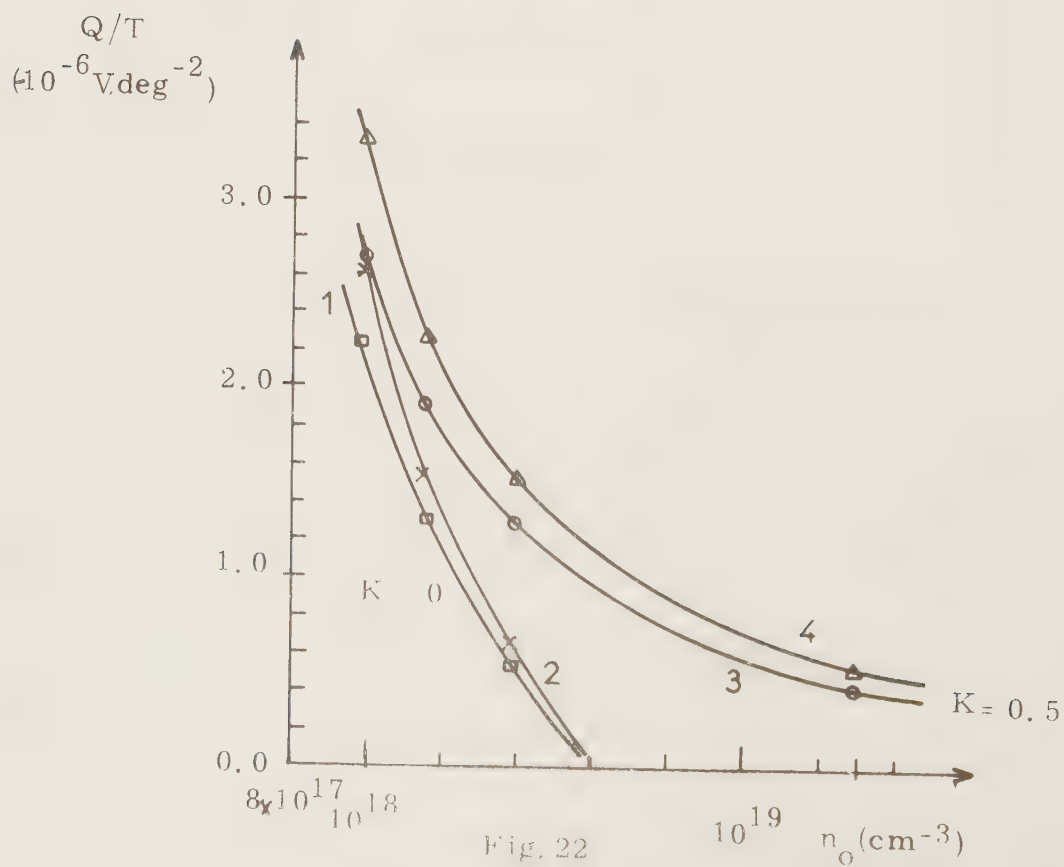


Fig. 22

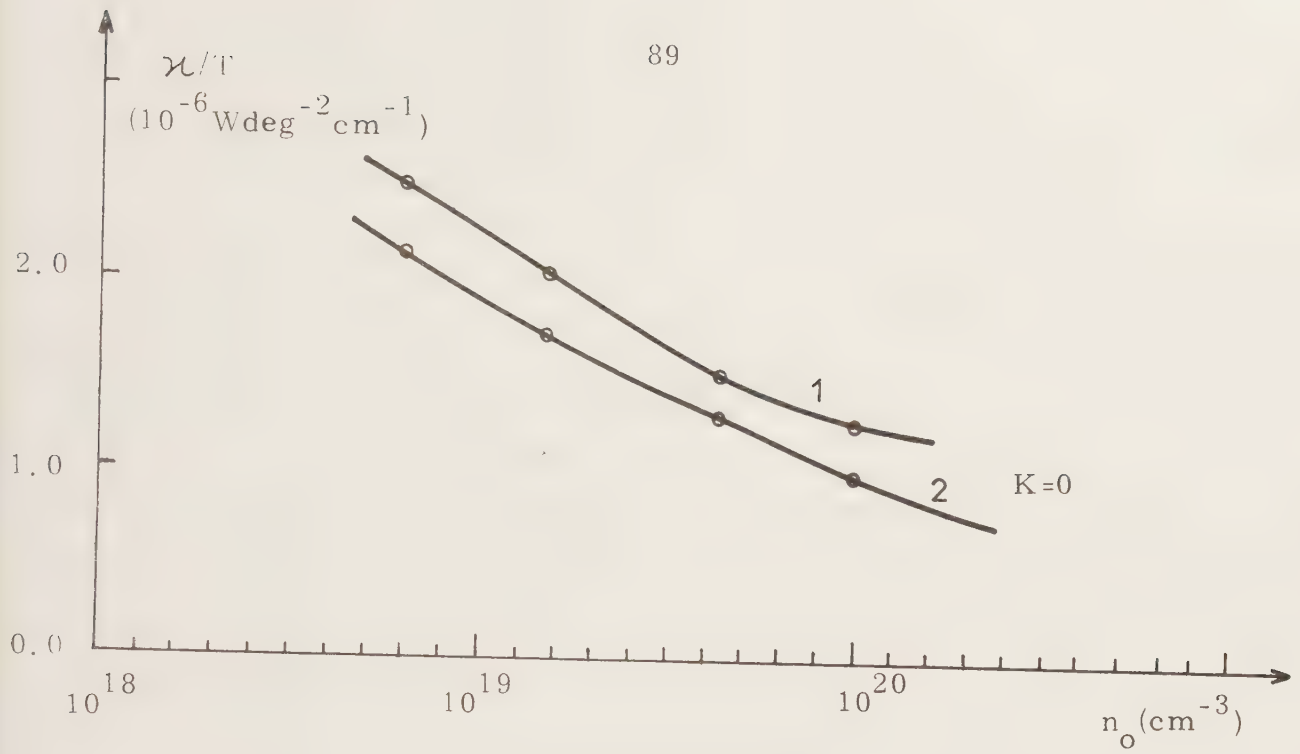


Fig. 23

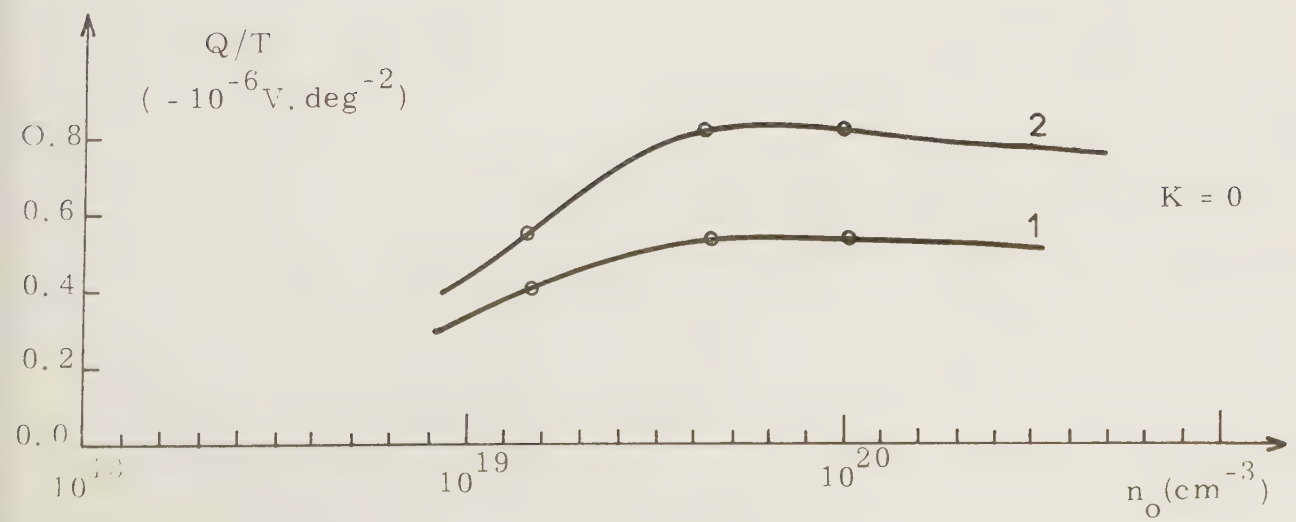


Fig. 24

VIII . Coefficient thermoélectrique et coefficient de Nernst dans un faible champ magnétique

A - Description générale

Dans ce chapitre , nous allons étudier le coefficient thermoélectrique et l'effet Nernst dans la bande d'impuretés à basse température .

Les coefficients de transport correspondants dans un faible champ magnétique $\vec{H} = (0, 0, H)$ sont déterminés à partir de l'équation phénoménologique

$$\frac{\partial_m \mu}{e} = \sum_n \varrho_{mn}(H) j_n + \sum_n Q_{mn}(H) \partial_n T, \quad (\text{VIII. 1})$$

où j_n est la $n^{\text{ème}}$ composante du courant électrique , ∂_n la $n^{\text{ème}}$ composante d'un gradient , ϱ_{mn} et Q_{mn} les composantes des tenseurs de résistivité et de coefficient thermoélectrique , et E_F l'énergie de Fermi (ou potentiel électrochimique) .

Nous considérons le système isotrope dans l'approximation d'ordre (0, 0, 2) où $|E_O/\sigma|$ et $\pi kT/\sigma$ sont petits par rapport à l'unité et nous ne garderons que les termes en H^2 pour le champ magnétique .

Les effets importants sont les suivants :

A.1 - Coefficient thermoélectrique transversal . Pour $\nabla T = (\partial_x T, 0, 0)$ et $\vec{j} = (0, 0, 0)$, on a

$$Q_{xx}^{(0,0,2)} = \frac{\partial_x E_F}{e \partial_x T} = Q_{xx}^{(0,0,0)} + Q_{xx}^{(2)} H^2, \quad \text{avec} \quad Q_{xx}^{(2)} = \partial Q_{xx}^{(0,0,2)} / \partial (H^2). \quad (\text{VIII. 2})$$

A.2 - Coefficient thermoélectrique longitudinal . Pour $\nabla T = (0, 0, \partial_z T)$ et $\vec{j} = (0, 0, 0)$, on a

$$Q_{zz}^{(0,0,2)} = \frac{\partial_z E_F}{e \partial_z T} = Q_{zz}^{(0,0,0)} + Q_{zz}^{(2)} H^2, \quad \text{avec} \quad Q_{zz}^{(2)} = \partial Q_{zz}^{(0,0,2)} / \partial (H^2). \quad (\text{VIII. 3})$$

A.3 - Effet Nernst isothermique . Pour $\vec{j} = (0, 0, 0)$ et $\partial_y T = 0$, une force électromotrice est produite suivant la direction y , proportionnelle au champ magnétique H et à $\partial_x T$. Le coefficient de Nernst est

$$N_T = \frac{\partial_y E_F}{(e H \partial_x T)} = -Q_1, \quad \text{avec} \quad Q_1 = \partial Q_{xy} / \partial H. \quad (\text{VIII. 4})$$

En présence d'un faible champ magnétique, nous avons montré [31, 32] que (cf. Appendice A) :

$$Q_{xx}(H) = \left(\frac{1}{T} \right) \left\{ \frac{E_F}{e} + \frac{L_0^{(2)}}{L_0^{(1)}} + \left[\frac{L_{xxx}^{(2)}}{L_0^{(1)}} - \frac{L_{xxx}^{(1)} L_0^{(1)} + (L_{xyz}^{(1)})^2}{(L_0^{(1)})^3} L_0^{(2)} + \frac{L_{xyz}^{(1)} + L_{xyz}^{(2)}}{(L_0^{(1)})^2} \right] H^2 \right\}, \quad (\text{VIII. 5})$$

$$Q_{zz}(H) = \left(\frac{1}{T} \right) \left\{ \frac{E_F}{e} + \frac{L_0^{(2)}}{L_0^{(1)}} + \left[\frac{L_{zzz}^{(2)}}{L_0^{(1)}} - \frac{L_{zzz}^{(1)} L_0^{(1)} + (L_{xyz}^{(1)})^2}{(L_0^{(1)})^3} L_0^{(2)} \right] H^2 \right\}, \quad (\text{VIII. 6})$$

$$Q_{xy}(H) = \left(\frac{1}{T} \right) \left\{ \frac{L_{xyz}^{(2)}}{L_0^{(1)}} - \frac{L_{xyz}^{(1)} L_0^{(2)}}{(L_0^{(1)})^2} \right\} H,$$

où

$$L_{xxx}^{(i)} = \frac{\partial L_{xx}^{(i)}}{\partial (H^2)}, \quad L_{zzz}^{(i)} = \frac{\partial L_{zz}^{(i)}}{\partial (H^2)}, \quad L_{xyz}^{(i)} = \frac{\partial L_{xy}^{(i)}}{\partial H}.$$

Comme on l'a vu les chapitres V et VI concernant l'effet Hall et la magnéto-résistance ordinaire, les expressions (VIII. 5) et (VIII. 6) peuvent être écrites :

$$Q_{xx}(T, \varrho, H) \approx \left(\frac{1}{T} \right) \left\{ \frac{E_F}{e} + \frac{L_0^{(2)}}{L_0^{(1)}} + \left[\frac{L_{xxx}^{(2)}}{L_0^{(1)}} - \frac{L_{xxx}^{(1)} L_0^{(2)}}{[L_0^{(1)}]^2} \right] H^2 \right\}, \quad (\text{VIII. 8})$$

$$Q_{zz}(T, \varrho, H) \approx \left(\frac{1}{T} \right) \left\{ \frac{E_F}{e} + \frac{L_0^{(2)}}{L_0^{(1)}} + \left[\frac{L_{zzz}^{(2)}}{L_0^{(1)}} - \frac{L_{zzz}^{(1)} L_0^{(2)}}{[L_0^{(1)}]^2} \right] H^2 \right\}. \quad (\text{VIII. 9})$$

On remarque que le coefficient thermoélectrique transversal et longitudinal et le coefficient $Q_{xy}^{(H)}$ sont des fonctions des coefficients de transport $L_{xx}^{(i)}$, $L_{zz}^{(i)}$ et $L_{xy}^{(i)}$.

B - Coefficients de transport $L_{xx}^{(i)}$, $L_{zz}^{(i)}$ et $L_{xy}^{(i)}$

Comme dans le chapitre VII concernant la définition des coefficients de transport $L_O^{(1)}$, $L_O^{(2)}$ et $L_{xy}^{(1)}$, $L_{xy}^{(2)}$, on a d'une façon générale,

$$L_{\alpha\beta}^{(1)}(T, \varrho, H) = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_{\alpha\beta}(E, \varrho, H) \left\{ -\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right\} dE, \quad (\text{VIII. 10})$$

$$L_{\alpha\beta}^{(2)}(T, \varrho, H) = \left(-\frac{1}{e} \right) \int_{-\infty}^{\infty} E \Phi_{\alpha\beta}(E, \varrho, H) \left\{ -\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right\} dE. \quad (\text{VIII. 11})$$

où $\Phi_{\alpha\beta}$ sont les composantes du tenseur de conductivité statique dans un faible champ magnétique, déjà calculés dans les chapitres V et VI; le calcul de ces intégrales est analogue à ceux de ces chapitres [28, 30, 31, 32].

On obtient :

B.1 - Coefficient thermoélectrique $Q_{xx}^{(0,0,2)}$ transversal.

a) Coefficients $L_{xx}^{(1)}$ et $L_{xx}^{(2)}$ dans un champ magnétique nul. On a :

$$\begin{aligned} L_{xx,0}^{(1)}(T, \varrho) = X_1 & \left\{ \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left[\delta_1 \Gamma(m+1) - \delta_2 \Gamma\left(m + \frac{1}{2}\right) \right] + \right. \\ & + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left[\delta_1 \Gamma\left(m + \frac{1}{2}\right) - \delta_2 \Gamma(m+1) \right] \left(\frac{E_F}{\sigma} \right) + \\ & + \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{m! l! (m+l+1)} \left[\frac{\delta_1}{(2m+2l+1)\sigma^{2m+2l+2}} \times \right. \\ & \left. \times \sum_{\mu=0,2,\dots}^{p=2m+2l+2} P_{\mu,p} + \frac{\delta_2}{(2m+2l+3)\sigma^{2m+2l+3}} \sum_{\mu'=0,2,\dots}^{p'=2m+2l+3} P_{\mu',p'} \right] \left. \right\} \end{aligned} \quad (\text{VIII. 12})$$

et

$$\begin{aligned}
L_{xx,0}^{(2)}(T, \varrho) = & -\frac{X_1 \sigma}{e} \left\{ \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left[\delta_1 \Gamma(m+1) - \delta_2 \Gamma\left(m + \frac{3}{2}\right) \right] \left(\frac{E_F}{\sigma} \right) + \right. \\
& + \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left[\delta_1 \Gamma\left(m + \frac{1}{2}\right) - \delta_2 \Gamma(m+1) \right] \sum_{\mu=0,2}^{p=2} P_{\mu,2} + \\
& + \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{m! l! (m+l+1)} \left[\frac{\delta_1}{(2m+2l+1) \sigma^{2m+2l+3}} \sum_{\mu=0,2,\dots}^{p=2m+2l+3} P_{\mu,p} + \right. \\
& \left. \left. + \frac{\delta_2}{(2m+2l+3) \sigma^{2m+2l+1}} \sum_{\mu'=0,2,\dots}^{p'=2m+2l+4} P_{\mu',p'} \right] \right\}.
\end{aligned}$$

(VIII.13)

où

$$\int_{-\infty}^{\infty} E^p \left\{ - \frac{\partial f(E)}{\partial E} \right\} dE = \sum_{\mu=0,2,\dots}^p C_p^{\mu} (k_B T)^{\mu} E_F^{p-\mu} (2^{\mu} - 2) \pi^{\mu} B_{(1/2)\mu} \equiv \sum_{\mu=0,2,\dots}^p P_{\mu,p}$$

b) Contributions orbitales aux $L_{xx}^{(1)}$ et $L_{xx}^{(2)}$. Nous obtenons :

$$\begin{aligned}
L_{xx, \text{orb.}}^{(1)}(T, \varrho, H) \approx & -\frac{X_1'}{2} \left(\frac{\mu_B^* H}{\sigma} \right)^2 \left\{ \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left[\delta_1 \Gamma\left(m + \frac{1}{2}\right) + \delta_2 \Gamma(m+1) \right] - \right. \\
& - \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{m! l! \sigma^{2m+2l+1}} \left[\frac{2 \delta_1}{(2m+2l+1)} \sum_{\mu=0,2,\dots}^{p=2m+2l+1} P_{\mu,p} + \right. \\
& \left. \left. + \frac{\delta_2}{(m+l+1) \sigma} \sum_{\mu'=0,2,\dots}^{p'=2m+2l+2} P_{\mu',p'} \right] \right\}
\end{aligned}$$

(VIII.14)

et

$$\begin{aligned}
L_{xx, \text{orb.}}^{(2)}(T, \varrho, H) \approx & \frac{\sigma X_1'}{2e} \left(\frac{\mu_B^* H}{\sigma} \right)^2 \left\{ \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left[\delta_1 \Gamma\left(m + \frac{1}{2}\right) + \delta_2 \Gamma(m+1) \right] \left(\frac{E_F}{\sigma} \right) - \right. \\
& - \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{m! l! \sigma^{2m+2l+2}} \left[\frac{2 \delta_1}{(2m+2l+1)} \sum_{\mu=0,2,\dots}^{p=2m+2l+2} P_{\mu,p} + \right. \\
& \left. \left. + \frac{\delta_2}{(m+l+1) \sigma} \sum_{\mu'=0,2,\dots}^{p'=2m+2l+3} P_{\mu',p'} \right] \right\}.
\end{aligned}$$

(VIII.15)

c) Contributions de spin aux $L_{xx}^{(1)}$ et $L_{xx}^{(2)}$. On a :

$$L_{xx, \text{spin}}^{(1)}(T, \varrho, H) \approx X_1 \left(\frac{g^* \mu_B^* H}{2 \sigma} \right)^2 \sum_{m, l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{m! l!} \left\{ \delta_1 \sum_{\mu=0, 2, \dots}^{p-2m-2l} \frac{P_{\mu, p}}{\sigma^p} + \delta_2 \sum_{\mu'=0, 2, \dots}^{p'-2m-2l-1} \frac{P_{\mu', p'}}{\sigma^{p'}} \right\} \quad (\text{VIII. 16})$$

$$L_{xx, \text{spin}}^{(2)}(T, \varrho, H) \approx - \frac{\sigma}{e} X_1 \left(\frac{g^* \mu_B^* H}{2 \sigma} \right)^2 \sum_{m, l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{m! l!} \left\{ \delta_1 \sum_{\mu=0, 2, \dots}^{p-2m+2l+1} \frac{P_{\mu, p}}{\sigma^p} + \delta_2 \sum_{\mu'=0, 2, \dots}^{p'-2m+2l-2} \frac{P_{\mu', p'}}{\sigma^{p'}} \right\}. \quad (\text{VIII. 17})$$

Tenant compte des expressions de E_F et σ , on obtient à partir de l'expression (VIII. 5),

$$Q_{xx}^{(0, 0, 2)} \approx Q_{xx}^{(0, 0, 0)} \left\{ 1 - 1.25 \left(\frac{\mu_B^* H}{\pi k_B T} \right)^2 + 3.85 \left(\frac{g^* \mu_B^* H}{2 \pi k_B T} \right)^2 \right\}, \quad (\text{VIII. 18})$$

où

$$Q_{xx}^{(0, 0, 0)} = -0.624 \frac{(\pi k_B)^2 T}{3 e \sigma^{(0, 0, 0)}}, \quad \sigma^{(0, 0, 0)} = A \varrho^{4/9},$$

B. 2 - Coefficient thermoélectrique $Q_{zz}^{(0, 0, 2)}$ longitudinal.

Appliquant la même méthode, on a

$$Q_{zz}^{(0, 0, 2)} \approx Q_{zz}^{(0, 0, 0)} \left\{ 1 - 1.00 \left(\frac{\mu_B^* H}{\pi k_B T} \right)^2 + 3.08 \left(\frac{g^* \mu_B^* H}{2 \pi k_B T} \right)^2 \right\}, \quad (\text{VIII. 19})$$

où

$$Q_{zz}^{(0, 0, 0)} = -0.620 \frac{(\pi k_B)^2 T}{3 e \sigma^{(0, 0, 0)}}.$$

Nous avons ici $Q_{xx}^{(0, 0, 2)} \approx Q_{zz}^{(0, 0, 2)} \approx Q^{(0, 0)}$, où $Q^{(0, 0)}$ est le coefficient thermoélectrique dans un champ magnétique nul, calculé dans le chapitre VII; les valeurs exactes auraient été les mêmes.

B. 3 - Coefficient Q_{xy} dans un faible champ magnétique.

D'abord, on a $L_{xy}^{(1)} \equiv \sigma_{xy}^{(1)}$, relation déjà obtenue au chapitre V :

$$L_{xy}^{(1)} = -1.61 Y \left\{ 1 + 2.48 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + \dots + 0.11 \left(\frac{\pi k_B T}{\sigma} \right)^2 + \dots \right\} \quad (\text{VIII. 20})$$

et

$$L_{xy}^{(2)} = +1.61 \frac{Y \sigma}{e} \left\{ \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + \dots + 0.565 \left(\frac{\pi k_B T}{\sigma} \right)^2 + \dots \right\}. \quad (\text{VIII. 21})$$

Tenant compte des équations (III.16) et (VIII.7) , on obtient le développement , dont les premiers termes sont seuls explicités

$$Q_{xy} \approx Q_{xy}^{(0,0)} \left\{ 1 - 0.59 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + \dots - \left(\frac{\pi k T}{\sigma} \right)^2 \right\} , \quad (\text{VIII.22})$$

où

$$Q_{xy}^{(0,0)} = \frac{0.6 \hbar (\pi k)^2 \rho^{-8/9} T H}{m^* c A^2} .$$

C - Discussion

Deux cas typiques seront considérés .

C.1 - Cas où $n_0 = p - n_a$

Nous nous plaçons d'abord dans l'approximation de Thomas -Fermi avec $L = L_e$. Les composantes transversale et longitudinale du coefficient magnéto-thermoélectrique ou coefficient de magnéto-Seebeck sont données respectivement par

$$\text{et} \quad \frac{\Delta Q_{xx}}{Q_{xx}^{(0,0,0)}} = \frac{Q_{xx}^{(2)} H^2}{Q_{xx}^{(0,0,0)}} \approx \left\{ -1.25 + 3.85 \left(\frac{g^*}{2} \right)^2 \right\} \left(\frac{\mu_B^*}{\pi k_B T} \right)^2 H^2 \quad (\text{VIII.23})$$

$$\frac{\Delta Q_{zz}}{Q_{zz}^{(0,0,0)}} = \frac{Q_{zz}^{(2)} H^2}{Q_{zz}^{(0,0,0)}} \approx \left\{ -1.00 + 3.08 \left(\frac{g^*}{2} \right)^2 \right\} \left(\frac{\mu_B^*}{\pi k_B T} \right)^2 H^2 . \quad (\text{VIII.24})$$

Dans ces équations , les premiers et seconds termes représentent respectivement les contributions du mouvement orbital et du spin au coefficient magnéto-thermoélectrique . On peut conclure que , pour une température donnée , la contribution orbitale est négative et proportionnelle au carré du champ magnétique . La même conclusion résulte de la contribution du spin , mais celle-ci est positive et plus petite que la contribution orbitale dans un semi-conducteur ordinaire où la masse effective est assez faible .

D'autre part , dans l'approximation d'ordre (0,0) , le coefficient de Nernst N_T est donné , à partir des relations (VIII.4) et (VIII.22) , par

$$N_T^{(0,0)} = -\frac{0.6 \hbar (\pi k_B)^2}{m^* c A^2} \rho^{*-8/9} T, \quad \text{avec } \rho^* = \rho + n_a, \quad (\text{VIII.25}).$$

Le signe du coefficient de Nernst dans la bande d'impuretés pour les semi-conducteurs de type n est toujours négatif, comme il a été qualitativement trouvé par Domanskaya et ses collaborateurs [12]. Pour une température donnée, le coefficient de Nernst est proportionnel à la puissance $-8/9$ de la densité des donneurs (ou des électrons) dans le cas où il n'y a pas de compensation. Quand la densité des donneurs croît, il décroît rapidement en valeur absolue.

Nous prenons n-Ge comme exemple. Dans ce cas, en introduisant la masse effective cyclotronique $m_c^* = 0.14 m_0$, trouvée dans le chapitre VI, pour le calcul de N_B^* et g^* , on obtient :

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{\Delta Q_{xx}}{Q_{xx}^{(0,0,0)}} \right)_{\text{orb.}, T=10^\circ \text{K}} &\approx -339.48 \times 10^{-12} H^2, \\ \left(\frac{\Delta Q_{xx}}{Q_{xx}^{(0,0,0)}} \right)_{\text{spin}, T=10^\circ \text{K}} &\approx +20.35 \times 10^{-12} H^2, \\ \left(\frac{\Delta Q_{zz}}{Q_{zz}^{(0,0,0)}} \right)_{\text{orb.}, T=10^\circ \text{K}} &\approx -271.59 \times 10^{-12} H^2, \\ \left(\frac{\Delta Q_{zz}}{Q_{zz}^{(0,0,0)}} \right)_{\text{spin}, T=10^\circ \text{K}} &\approx +16.28 \times 10^{-12} H^2. \end{aligned} \right\}$$

Ces valeurs sont indépendantes du dopage. Au contraire, le coefficient de Nernst, pour une température donnée, dépend du dopage. Le tableau [32] en donne des valeurs.

Tableau 32 - Coefficient de Nernst en fonction de dopage dans le cas où $L = L_e$, calculé à partir de l'expression (VIII.22).

$\rho \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	10^{18}	1.9×10^{18}	4×10^{18}
$-N_T/T \text{ (} 10^{-14} \text{ cgs)}$	9.78	5.43	2.59

En tenant compte de l'effet d'écran dû aux ions , on obtient les résultats du tableau 33 .

Tableau 33 - Coefficient de Nernst en fonction du dopage dans le cas où $1/L = 1/L_i + 1/L_e$, calculé à partir de l'expression (VIII. 22) .

$\rho \text{ (cm}^{-3} \text{)}$	10^{18}	1.9×10^{18}	4×10^{18}
$-N_T/T \text{ (} 10^{-14} \text{ cgs)}$	13.08	7.27	3.76

En présence d'accepteurs avec $n_a = 0.5 \rho$, les résultats sont donnés par les tableaux 34 et 35 (cf. Figure 25) .

Tableau 34 - Coefficient de Nernst en fonction du dopage dans le cas où $L = L_e$, calculé à partir de l'expression (VIII. 23) .

$\rho \text{ (cm}^{-3} \text{)}$	10^{18}	1.9×10^{18}	4×10^{18}
$-N_T/T \text{ (} 10^{-14} \text{ cgs)}$	7.37	4.18	2.05

Tableau 35 - Coefficient de Nernst en fonction du dopage dans le cas où $1/L = 1/L_i + 1/L_e$.

$\rho \text{ (cm}^{-3} \text{)}$	10^{18}	1.9×10^{18}	4×10^{18}
$-N_T/T \text{ (} 10^{-14} \text{ cgs)}$	10.97	5.77	3.25

C.2 - Cas où $n_o = \beta \rho^{1/3} - n_a$.

On obtient dans le cas où il n'y a pas de compensation et dans l'approximation de Thomas -Fermi avec un effet d'écran dû uniquement aux ions , le coefficient de Nernst s'écrit

$$N_T^{(0,0)} = - \frac{0.6 \hbar (\pi k_B)^2 \times (n_o/\beta)^{-8/3} \times T}{m^* c A^2} . \quad (\text{VIII. 26})$$

Ici , pour une température donnée , N_T est proportionnelle à la puissance $-8/3$ de la densité des électrons . Il est donné en fonction du dopage par les

tableaux 36 et 37 .

Tableau 36 - Coefficient de Nernst en fonction du dopage dans le cas où $L = L_e$.

$\rho \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	8×10^{18}	1.89×10^{18}	6.4×10^{19}	10^{20}
$-N_T/T \text{ (} 10^{-14} \text{ cgs)}$	10.77	5.63	2.07	1.30

Tableau 37 - Coefficient de Nernst en fonction du dopage dans le cas où $1/L = 1/L_i + 1/L_e$.

$\rho \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	8×10^{18}	1.89×10^{18}	6.4×10^{19}	10^{20}
$-N_T/T \text{ (} 10^{-14} \text{ cgs)}$	19.56	11.19	4.82	3.27

Ces résultats sont résumés sur la figure 26 .

D'autre part , le coefficient magnéto-thermoélectrique est inchangé dans cette hypothèse ($n_o = \beta \rho^{1/3} - n_a$) car il est toujours indépendant de ρ ou de n_o dans l'approximation d'ordre (0,0,2) .

Nous obtenons , pour n-GaAs , les composantes du coefficient magnéto-thermoélectrique ,

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{\Delta Q_{xx}}{Q_{xx}^{(0,0,0)}} \right)_{\text{orb.}, T = 10^\circ \text{K}} &\approx - 1284 \times 10^{-12} H^2 , \\ \left(\frac{\Delta Q_{xx}}{Q_{xx}^{(0,0,0)}} \right)_{\text{spin}, T = 10^\circ \text{K}} &\approx + 191 \times 10^{-12} H^2 , \\ \left(\frac{\Delta Q_{zz}}{Q_{zz}^{(0,0,0)}} \right)_{\text{orb.}, T = 10^\circ \text{K}} &\approx - 1027 \times 10^{-12} H^2 , \\ \left(\frac{\Delta Q_{zz}}{Q_{zz}^{(0,0,0)}} \right)_{\text{spin}, T = 10^\circ \text{K}} &\approx + 153 \times 10^{-12} H^2 , \end{aligned} \right\}$$

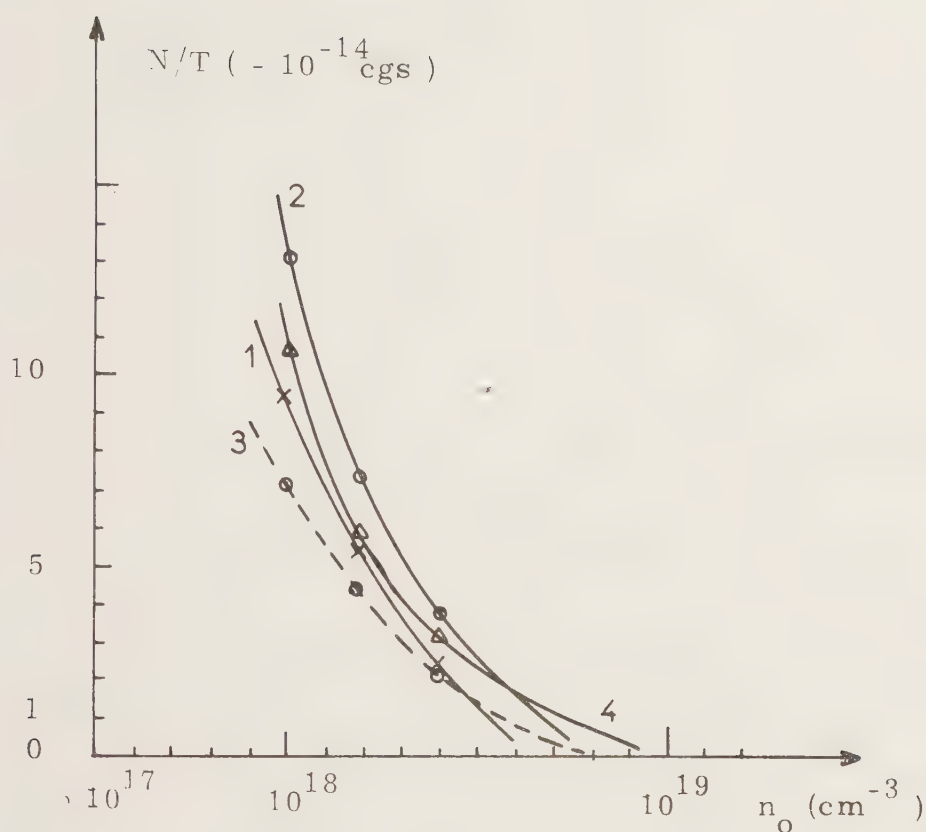


Fig. 25

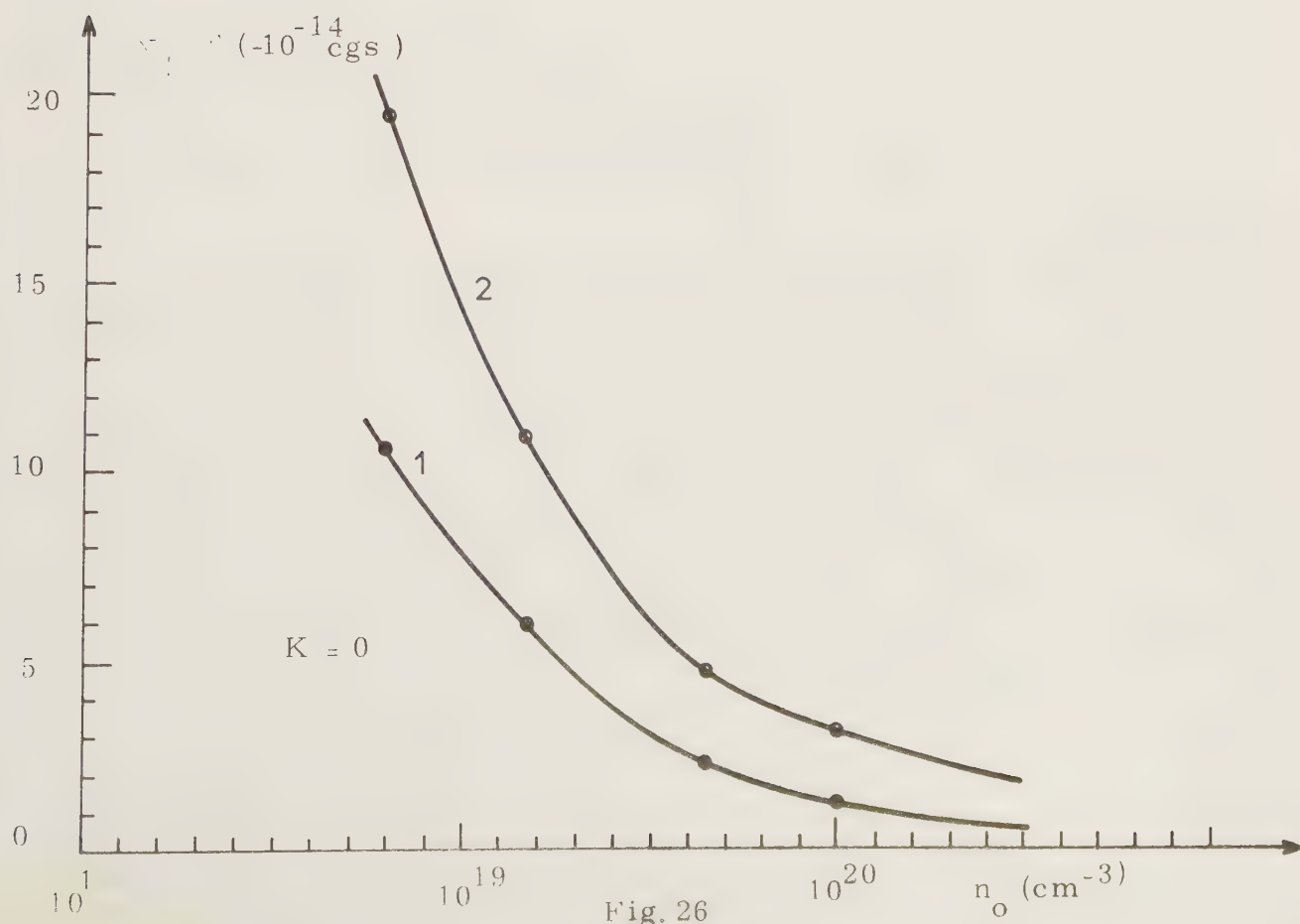


Fig. 26

IX . Quelques effets thermomagnétiques et adiabatiques

A - Description générale .

Les coefficients du transport électronique (pour la charge $-e$) , dans un faible champ magnétique $\vec{H} = (0, 0, H)$, sont déterminés à partir des équations phénoménologiques :

$$\partial_m(E_F/e) = \sum_n \rho_{mn}(H) j_n + \sum_n Q_{mn}(H) \partial_n T \quad (\text{IX. 1})$$

et

$$j_m^Q = T \sum_n Q_{mn}(H) j_n - \sum_n \kappa_{mn}(H) \partial_n T, \quad (\text{IX. 2})$$

Dans ces équations j_n et j_n^Q sont les $n^{\text{ème}}$ composantes de la densité du courant électronique et de la densité du courant calorifique ; ∂_n est la $n^{\text{ème}}$ composante d'un gradient ; ρ_{mn} , Q_{mn} et κ_{mn} sont respectivement les composantes des tenseurs de résistivité , de coefficient thermoélectrique et de conductivité thermique électronique . Les composantes ont déjà été étudiées dans les chapitres V , VI , VII et VIII . Il nous reste à étudier les composantes de la conductivité thermique κ_{mn} .

Comme dans le chapitre VIII , nous utilisons l'approximation d'ordre $(0, 0, 2)$ où nous limitons les développements au second ordre en H .

Les phénomènes physiques résultant de conductivité thermique des électrons sont étudiés ci-dessous .

A.1 - Conductivité thermique transversale . Pour $\vec{j} = (0, 0, 0)$ et $\partial_y T = 0$, un courant de chaleur est produit par un gradient de température suivant l'axe des x . La conductivité thermique transversale est donnée par

$$\kappa_{xx}^{(0,0,2)} = - \frac{j_x^Q}{\partial_x T} = \kappa_{xx}^{(0,0,0)} + \kappa_{xx}^{(2)} H^2, \quad (\text{IX. 3})$$

où

$$\kappa_{xx}^{(2)} = i \kappa_{xx}^{(0,0,2)} / i(H^2).$$

A.2 - Conductivité thermique longitudinale . Pour $\vec{j} = (0, 0, 0)$ et $\frac{\partial T}{\partial y} = 0$, un courant de chaleur est produit par un gradient de température suivant l'axe des z . La conductivité thermique longitudinale est donnée par

$$\kappa_{zz}^{(0,0,2)} = -\frac{j_z^0}{\partial_z T} = \kappa_{zz}^{(0,0,0)} + \kappa_{zz}^{(2)} H^2, \quad (\text{IX. 3})'$$

où

$$\kappa_{zz}^{(2)} = \partial \kappa_{zz}^{(0,0,2)} / \partial (H^2).$$

Les composantes κ_{xx} , κ_{zz} et κ_{xy} sont calculées à partir des coefficients $L_{xx}^{(i)}$, $L_{zz}^{(i)}$ et $L_{xy}^{(i)}$ (cf. Appendice A) :

$$\begin{aligned} \kappa_{xx}(H) = \frac{1}{T} \left\{ L_0^{(4)} - \frac{(L_0^{(2)})^2}{L_0^{(1)}} + \left[L_{xxxz}^{(4)} + \frac{\{L_{xxxz}^{(1)} L_0^{(1)} + (L_{xyz}^{(1)})^2\}}{(L_0^{(1)})^3} (L_0^{(2)})^2 - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{2 L_{xyz}^{(1)} L_0^{(2)} L_{xyz}^{(2)}}{(L_0^{(1)})^2} + \frac{(L_{xyz}^{(2)})^2}{L_0^{(1)}} - \frac{2 L_0^{(2)} L_{xxxz}^{(2)}}{L_0^{(1)}} \right] H^2 \right\}, \end{aligned} \quad (\text{IX. 4})$$

$$\begin{aligned} \kappa_{zz}(H) = \frac{1}{T} \left\{ L_0^{(4)} - \frac{(L_0^{(2)})^2}{L_0^{(1)}} + \left[L_{zzzz}^{(4)} + \frac{\{L_{zzzz}^{(1)} L_0^{(1)} + (L_{zzz}^{(1)})^2\}}{(L_0^{(1)})^3} (L_0^{(2)})^2 - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{2 L_0^{(2)} L_{zzzz}^{(2)}}{L_0^{(1)}} \right] H^2 \right\}, \end{aligned} \quad (\text{IX. 5})$$

$$\kappa_{xy}(H) = \frac{1}{T} \left\{ L_{xyz}^{(4)} - \frac{2 L_0^{(2)} L_{xyz}^{(2)}}{L_0^{(1)}} + \frac{(L_0^{(2)})^2 L_{xyz}^{(1)}}{(L_0^{(1)})^2} \right\} H. \quad (\text{IX. 6})$$

D'après la remarque du chapitre VIII , les expressions (IX. 4) et (IX. 5) peuvent s'écrire approximativement

$$\kappa_{xx}(T, \varrho, H) \approx \frac{1}{T} \left\{ L_0^{(4)} - \frac{(L_0^{(2)})^2}{L_0^{(1)}} + \left[L_{xxxz}^{(4)} + \frac{L_{xxxz}^{(1)} (L_0^{(2)})^2}{(L_0^{(1)})^2} - \frac{2 L_0^{(2)} L_{xxxz}^{(2)}}{L_0^{(1)}} \right] H^2 \right\} \quad (\text{IX. 7})$$

et

$$\kappa_{zz}(T, \varrho, H) \approx \frac{1}{T} \left\{ L_0^{(4)} - \frac{(L_0^{(2)})^2}{L_0^{(1)}} + \left[L_{zzzz}^{(4)} + \frac{L_{zzzz}^{(1)} (L_0^{(2)})^2}{(L_0^{(1)})^2} - \frac{2 L_0^{(2)} L_{zzzz}^{(2)}}{L_0^{(1)}} \right] H^2 \right\}. \quad (\text{IX. 8})$$

Dans ces équations , les coefficients $L_{xx}^{(1)}$, $L_{xx}^{(2)}$, $L_{zz}^{(1)}$, $L_{zz}^{(2)}$, $L_{xy}^{(1)}$ et $L_{xy}^{(2)}$ ont les valeurs déjà calculées au chapitre VIII . Les autres coefficients $L_{\alpha\beta}^{(4)}$ sont déterminés d'une façon analogue :

$$L_{\alpha\beta}^{(4)}(T, \varrho, H) = \frac{1}{e^2} \int_{-\infty}^{+\infty} E^2 \Phi_{\alpha\beta}(E, \varrho, H) \left\{ -\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right\} dE. \quad (\text{IX. 9})$$

B - Quelques effets thermomagnétiques

B.1 - Conductivité thermique transversale . Les composantes transversales des coefficients de transport $L_{xx}^{(4)}$ sont déterminées à partir de la formule (IX. 9) .

En l'absence de champ magnétique , on a :

$$\begin{aligned}
 L_{xx,0}^{(4)}(T, \varrho) = & \frac{x_1 \sigma^2}{e^2} \left\{ \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left[(\delta_1 \Gamma(m+1) - \delta_2 \Gamma(m+3/2)) \sum_{\mu=0,2}^{p=2} \frac{P_{\mu,p}}{\sigma^p} - \right. \right. \\
 & - ((\delta_1 \Gamma(m+1/2) - \delta_2 \Gamma(m+1)) \sum_{\mu'=0,2,\dots}^{p'=3} \frac{P_{\mu',p'}}{\sigma^{p'}}) \left. \right] + \\
 & + \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{m! l! (m+l+1)} \left[\left(\frac{\delta_1}{2m+2l+1} \right)^{p=2m+2l+4} \sum_{\mu=0,2,\dots} \frac{P_{\mu,p}}{\sigma^p} + \right. \\
 & \left. \left. + \left(\frac{\delta_2}{2m+2l+3} \right)^{p'=2m+2l+5} \sum_{\mu'=0,2,\dots} \frac{P_{\mu',p'}}{\sigma^{p'}} \right] \right\}. \tag{IX. 10}
 \end{aligned}$$

En présence d'un faible champ magnétique , on obtient :

$$\begin{aligned}
 L_{xx, \text{orb.}}^{(4)}(T, \varrho, H) \approx & - \left(\frac{X_1 \sigma^2}{2 e^2} \right) \left(\frac{\mu_B^* H}{\sigma} \right)^2 \left\{ \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} [\delta_1 \Gamma(m+1/2) + \delta_2 \Gamma(m+1)] \times \right. \\
 & \times \sum_{\mu=0,2}^{p=2} \frac{P_{\mu,2}}{\sigma^2} - \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{m! l!} \left[\left(\frac{2 \delta_1}{2m+2l+1} \right)^{p=2m+2l+3} \sum_{\mu=0,2,\dots} \frac{P_{\mu,p}}{\sigma^p} + \right. \\
 & \left. \left. + \left(\frac{\delta_2}{m+l+1} \right)^{p'=2m+2l+4} \sum_{\mu'=0,2,\dots} \frac{P_{\mu',p'}}{\sigma^{p'}} \right] \right\}. \tag{IX. 11}
 \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
 L_{xx, \text{spin}}^{(4)}(T, \varrho, H) \approx & \frac{X_1 \sigma^2}{e^2} \left(\frac{g^* \mu_B^* H}{2 \sigma} \right)^2 \sum_{m,l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{m! l!} \times \\
 & \times \left\{ \delta_1 \sum_{\mu=0,2,\dots}^{p=2m+2l+2} \frac{P_{\mu,p}}{\sigma^p} + \delta_2 \sum_{\mu'=0,2,\dots}^{p'=2m+2l+3} \frac{P_{\mu',p'}}{\sigma^{p'}} \right\}. \tag{IX. 12}
 \end{aligned}$$

Dans l'approximation d'ordre $(0, 0, 2)$, la conductivité thermique transversale est obtenue à partir de la formule (IX. 7), en remarquant que $L_{xx}^{(4)} = L_o^{(4)} + L_{xx, orb.}^{(4)} + L_{xx, s}^{(4)}$. On trouve alors

$$\begin{aligned} \kappa_{xx}^{(0,0,2)}(T, \varrho, H) &\approx \\ &\approx \kappa_{xx}^{(0,0,0)}(T, \varrho) \left\{ 1 - 1.23 \varrho^{-8/9} \left(\frac{\mu_B^* H}{A} \right)^2 + 2.16 \varrho^{-8/9} \left(\frac{g^* \mu_B^* H}{2 A} \right)^2 \right\} \end{aligned} \quad , \quad (\text{IX. 13})$$

où $\kappa_{xx}^{(0,0,0)} = \frac{(\pi k_B)^2 T \sigma_{xx}^{(0,0,0)}}{3 e^2}$, avec la conductivité $\sigma_{xx}^{(0,0,0)}$ déjà calculée au chapitre VI.

B. 2 - Conductivité thermique longitudinale. Appliquant le même procédé, la conductivité thermique longitudinale est obtenue [32] sous la forme :

$$\begin{aligned} \kappa_{zz}^{(0,0,2)}(T, \varrho, H) &\approx \\ &\approx \kappa_{zz}^{(0,0,0)}(T, \varrho) \left\{ 1 - 0.90 \varrho^{-8/9} \left(\frac{\mu_B^* H}{A} \right)^2 + 3.76 \varrho^{-8/9} \left(\frac{g^* \mu_B^* H}{2 A} \right)^2 \right\} \end{aligned} \quad (\text{IX. 14})$$

où $\kappa_{zz}^{(0,0,0)} = \frac{(\pi k_B)^2 T \sigma_{zz}^{(0,0,0)}}{3 e^2}$, avec la conductivité $\sigma_{zz}^{(0,0,0)}$ déjà calculée au chapitre VI.

On a sensiblement $\chi_{xx}^{(0,0,0)} \approx \chi_{zz}^{(0,0,0)} \approx \chi^{(0,0)}$, où $\chi^{(0,0)}$ est la conductivité thermique déjà calculée au chapitre VII.

B. 3 - Calcul de la composante χ_{xy} . On calcule d'abord $L_{xy}^{(4)}$ à partir de la définition (IX. 9), en utilisant l'expression de $\bar{\Phi}_{xy}(E, \varrho, H)$ obtenue au chapitre V. On trouve :

$$\begin{aligned} L_{xy}^{(4)}(T, \varrho, H) &= - \frac{Y \sigma^2}{e^2} \sum_{m,l} \frac{(-1)^l}{m! l!} \left(\frac{3}{2} \right)^{m+l} \times \\ &\times \left\{ \alpha_1 \sum_{\mu=0,2,\dots}^{p=2m+2l+2} \frac{P_{\mu,p}}{\sigma^p} + \alpha_2 \sum_{\mu'=0,2,\dots}^{p'=2m+2l+3} \frac{P_{\mu',p'}}{\sigma^{p'}} \right\} \end{aligned} \quad (\text{IX. 15})$$

où α_1 et α_2 ont été définis au chapitre VIII.

La composante χ_{xy} est donc calculée à partir de la formule (IX. 6). En

En explicitant seulement les premiers termes , on obtient

$$\chi_{xy} \approx \chi_{xy}^{(0,0)}(T, \rho) \left\{ 1 + 3.62 \left(\frac{E_0}{\sigma} \right) + \dots - 0.03 \left(\frac{\pi k T}{\sigma} \right)^2 + \dots \right\}, \quad (\text{IX.16})$$

avec

$$\chi_{x,y}^{(0,0)} = - \frac{(\pi k_B)^2 T C_2 e^{-2/9}}{3 e^2}, \quad \text{où } C_2 \text{ a été défini au chapitre V.}$$

A partir des équations phénoménologiques (IX.1) et (IX.2) , on peut préciser les deux autres effets thermomagnétiques qui suivent .

B.4 - Effet Ettingshausen . On suppose qu'il n'y a pas de courant électrique, ni de courant de chaleur suivant l'axe des y et que $\partial_x T = 0$. Un gradient de température est donc produit suivant l'axe des y , proportionnel au champ magnétique et au courant j_x suivant l'axe des ox . Le coefficient d'Ettingshausen est donné par

$$(E)_T^{(0,0)} = \frac{\partial_y T}{H j_x} = - \frac{T Q_{xyz}^{(0,0)}}{\chi^{(0,0)}} = - \frac{1.8 h e^2 e^{-10/9} T}{m^* c A^2 C_1}, \quad (\text{IX.17})$$

où $Q_{xyz}^{(0,0)}$ et $\chi^{(0,0)}$ ont été calculés aux chapitres VII et VIII (avec $L = L_e$) . Dans notre approximation , ce coefficient est donc proportionnel à la puissance $-10/9$ de la densité des impuretés ρ , pour une température donnée .

B.5 - Effet Righi-Leduc . On suppose dans ce cas que $\vec{j} = (0, 0, 0)$ et qu'il n'y a pas de courant de chaleur dans la direction des y ($j_y^Q = 0$) . Un gradient de température est donc produit suivant la direction des y , proportionnel au champ magnétique H et au gradient de température suivant l'axe des x . Le coefficient de Righi-Leduc est

$$(R-L)_T^{(0,0)} = \frac{\partial_y T}{H \partial_x T} = \frac{\chi_{xyz}^{(0,0)}}{\chi^{(0,0)}} = - \frac{C_2}{H C_1} e^{-4/9} = - \frac{C_2^{(0)}}{C_1} e^{-4/9}, \quad (\text{IX.18})$$

où $\chi_{xyz}^{(0,0)}$ et $\chi^{(0,0)}$ ont déjà été déterminés aux chapitres VII et VIII (avec $L = L_e$) .

Dans cette approximation , ce coefficient est donc proportionnel à la puis-

sance $-4/9$ de la densité des impuretés ρ .

On doit remarquer que les effets calculés sont les effets purement électroniques mais, à une basse température, les effets dus au réseau sont négligeables vis-à-vis des effets électroniques.

C - Quelques effets adiabatiques

Nous nous proposons d'étudier les effets précédents et ceux qui ont été déjà étudiés aux chapitres V, VI, VII et VIII sous des conditions adiabatiques et non isothermiques. Ce terme "adiabatique" signifie qu'il n'y a pas d'échange thermique électronique; il correspond approximativement à l'absence d'un échange thermique total, à basse température.

C.1 - Résistivité électrique adiabatique. On suppose $J_y = \partial_x T = 0$ et $j_y^Q = 0$ au lieu de $\partial_y T = 0$ pour le cas isothermique. La composante transversale de la résistivité électrique adiabatique dans un faible champ magnétique s'écrit [32]

$$\rho_{A,xx} = \frac{\partial_x E_F}{e j_x} = \rho^{(0,0,0)} + \left\{ \rho_{xx}^{(2)} - \frac{T(Q_{xyz})^2}{\kappa^{(0,0)}} \right\} H^2$$

ou

$$\begin{aligned} \frac{\rho_{A,xx} - \rho^{(0,0,0)}}{\rho^{(0,0,0)}} &= \left\{ \frac{\rho_{xx}^{(2)}}{\rho^{(0,0,0)}} - \frac{T(Q_{xyz})^2}{\rho^{(0,0,0)} \kappa^{(0,0)}} \right\} H^2, \\ &= \left\{ 0.962 - 2.130 \left(\frac{g^*}{2} \right)^2 - 4.32 \left(\frac{\pi k_B T}{A \rho^{4/9}} \right)^2 \right\} \left(\frac{\mu_B^*}{A} \right)^2 e^{-8/9} H^2. \end{aligned} \quad (\text{IX. 19})$$

On obtient le même type de résultat pour la composante longitudinale de la résistivité électrique adiabatique, avec $\rho_{A,zz} = \partial_z E_F / e j_z$. On remarque que la résistivité ordinaire n'est pas changée, mais la magnétorésistance est différente.

C.2 - Effet Hall adiabatique. On substitue encore la condition $j_y^Q = 0$ à la condition $\partial_y T = 0$ du cas isothermique. Le coefficient de Hall s'écrit donc [32]

$$R_A = \frac{\partial_y E_F}{e H j_x} = R_T - \frac{T Q^{(0,0)} Q_{xyz}^{(0,0)}}{\kappa^{(0,0)}}, \quad \text{soit}$$

$$R_A = R_T^{(0,0)} \left\{ 1 + \dots + 0.13 \left(\frac{\pi k_B T}{A \varrho^{4/9}} \right)^2 + \dots \right\} + 0.35 R_T^{(0,0)} \left(\frac{\pi k_B T}{A \varrho^{4/9}} \right)^2,$$

$$= R_T^{(0,0)} \left\{ 1 + \dots + 0.48 \left(\frac{\pi k_B T}{A \varrho^{4/9}} \right)^2 + \dots \right\}, \quad (\text{IX. 20})$$

où $R_T^{(0,0)} = -C_2 \varrho^{-2/3} / (H C_1^2)$ a été trouvé au chapitre V.

C. 3 - Conductivité thermique adiabatique. Prenant $j_y^Q = 0$ au lieu de $\partial_y T = 0$, on trouve

$$\kappa_{A,xx}^{(0,0,2)} = - \frac{j_x^Q}{\partial_x T} = - \frac{(\kappa^{(0,0)} + \kappa_{xx}^{(2)} H^2) + (\kappa_{yz})^2 H^2}{\kappa^{(0,0)} + \kappa_{xx}^{(2)} H^2} \approx$$

ou

$$\approx \kappa^{(0,0)} + \left(\kappa_{xx}^{(2)} + \frac{(\kappa_{yz})^2}{\kappa^{(0,0)}} \right) H^2$$

$$\frac{\kappa_{A,xx}^{(0,0,2)} - \kappa^{(0,0)}}{\kappa^{(0,0)}} \approx \left\{ \frac{\kappa_{xx}^{(2)}}{\kappa^{(0,0)}} + \frac{(\kappa_{yz})^2}{(\kappa^{(0,0)})^2} \right\} H^2,$$

$$\approx \left\{ -1.20 + 2.16 \left(\frac{g^*}{2} \right)^2 \right\} \left(\frac{\mu_B^*}{A} \right)^2 \varrho^{-8/9} H^2. \quad (\text{IX. 21})$$

On remarque que la conductivité thermique électronique n'est pas changée, mais la magnéto-conductivité thermique est augmentée de la quantité

$$0.03 \left(\frac{\mu_B^* H}{A \varrho^{4/9}} \right)^2.$$

Par analogie, la composante longitudinale est calculée à partir de l'expression $\kappa_{A,zz}^{(0,0,2)} = -j_z^Q / \partial_z T$.

C. 4 - Effet Nernst adiabatique. Pour $j_y^Q = 0$ au lieu de $\partial_y T = 0$, on a

$$N_A^{(0,0)} = \frac{\partial_y E_F}{e H \partial_x T} = - \left\{ Q_{xyz}^{(0,0)} - \frac{Q^{(0,0)} \kappa_{yz}^{(0,0)}}{\kappa^{(0,0)}} \right\} \approx$$

$$\approx - \frac{0.316 \hbar (\pi k_B)^2 \varrho^{-8/9} T}{m^* e A^2}. \quad (\text{IX. 22})$$

D - Discussion.

Deux cas typiques seront encore considérés ici.

D.1 - Cas où $n_o = p - n_a$.

Nous considérons d'abord le cas où il n'y a pas de compensation avec $L = L_e$.

D.1.1 - Les composantes longitudinale et transversale de la magnéto-conductivité sont données respectivement par

$$\frac{\kappa_{xx}^{(0,0,2)} - \kappa_{xx}^{(0,0,0)}}{\kappa_{xx}^{(0,0,0)}} = \frac{\kappa_{xx}^{(2)}(T, \varrho) H^2}{\kappa_{xx}^{(0,0,0)}} \approx \left\{ -1.23 + 2.16 \left(\frac{g^*}{2} \right)^2 \right\} \left(\frac{\mu_B^*}{A} \right)^2 \varrho^{-8/9} H^2 \quad (\text{IX. 23})$$

et

$$\frac{\kappa_{zz}^{(0,0,2)} - \kappa_{zz}^{(0,0,0)}}{\kappa_{zz}^{(0,0,0)}} = \frac{\kappa_{zz}^{(2)}(T, \varrho) H^2}{\kappa_{zz}^{(0,0,0)}} \approx \left\{ -0.90 + 3.76 \left(\frac{g^*}{2} \right)^2 \right\} \left(\frac{\mu_B^*}{A} \right)^2 \varrho^{-8/9} H^2. \quad (\text{IX. 24})$$

Dans ces équations, les deux termes représentent respectivement les contributions du mouvement orbital et du spin à la magnéto-conductivité thermique. On peut conclure que, pour une concentration donnée des impuretés (des donneurs), la contribution orbitale est négative et proportionnelle à H^2 , comme pour la magnéto-conductivité thermique usuelle; pour un champ magnétique donné, elle est proportionnelle à la puissance $-8/9$ de la densité des donneurs (ou des électrons). La même conclusion est obtenue pour la contribution du spin; mais, celle-ci est positive et plus petite que la contribution orbitale pour un semi-conducteur usuel où la masse effective est peu élevée.

D.1.2 - Le coefficient d'Ettingshausen (cf. la formule (IX.17)), pour une bande d'impuretés très denses dans un semi-conducteur de type n, est toujours négatif comme cela a été qualitativement trouvé par Domanskaya et ses collaborateurs [12], comme pour le coefficient de Nernst [31] étudié dans le chapitre VIII. Pour une température donnée, ce coefficient est proportionnel à la puissance $-10/9$ de la densité des donneurs. Quand la concentration en impuretés augmente, il décroît rapidement en valeur absolue.

D.1.3 - Le coefficient de Righi-Leduc (cf. la formule (IX.18)) est aussi négatif et proportionnel à la puissance $-4/9$ de la densité des impuretés.

D.1.4 - On peut expliquer les effets adiabatiques décrits ci-dessus à l'aide de l'exemple suivant.

Supposons qu'on veuille mesurer une force électromotrice dirigée suivant l'axe des y due à un courant j_x dirigé suivant l'axe des x , dans un champ magnétique H , en tenant compte d'un gradient de température éventuel $\partial_x T$ dû à l'effet Peltier. Les électrodes de mesure de la force électromotrice peuvent dissiper de la chaleur, de sorte que ni j_y^Q ni $\partial_y T$ ne sont pas exactement connus. La force électromotrice est donnée par

$$\frac{\partial_y E_F}{e} = R_T(\rho, T) j_x H + Q^{(0,0)}(\rho, T) \partial_y T - Q_{xyz}^{(0,0)}(\rho, T) H \partial_x T \quad (\text{IX. 25})$$

ou

$$\frac{\partial_y E_F}{e} = R_A(\rho, T) j_x H - \frac{Q^{(0,0)}(\rho, T)}{\chi^{(0,0)}(\rho, T)} j_y^Q + N_A(\rho, T) H \partial_x T \quad (\text{IX. 26})$$

Si on suppose que $\partial_y T = 0$ ou $j_y^Q = 0$, on ne peut pas mesurer le coefficient de Hall R_T à mieux que $TQ^{(0,0)}Q_{xyz}^{(0,0)}/\chi^{(0,0)}$ (cf. l'équation (IX. 20)).

Finalement le calcul des effets étudiés se réduit de ceux de la résistivité ρ_{xx} (ou ρ_{zz}), du coefficient de Hall ρ_{xyz} , du coefficient thermo-électrique Q_{xx} (ou Q_{zz}), du coefficient Q_{xyz} , déjà calculés numériquement dans les chapitres V, VI, VII et VIII, et de la conductivité thermique χ_{xx} (ou χ_{zz}) et du coefficient χ_{xy} . Par suite, dans les exemples numériques qui suivent, nous ne considérons que la magnéto-conductivité thermique et le coefficient χ_{xy} .

A titre d'exemple, on a considéré comme semi-conducteur, le germanium de type n , et on a calculé la magnéto-conductivité thermique et le coefficient χ_{xy} dans les deux cas : $L = L_e$ et $1/L = 1/L_i + 1/L_e$. Les résultats sont indiqués dans les tableaux 38 et 39.

Tableau 38 - Magnéto-conductivité thermique et coefficient de χ_{xyz} dans le cas où $L = L_e$ et $n_a = 0$, calculés à partir des formules (IX. 13), (IX. 14) et (IX. 16)

ρ (cm ⁻³)	10^{18}	1.9×10^{18}	4×10^{18}
$(\Delta \chi_{xx} / H^2 \chi_{xx}) (10^{-12} \text{ cgs})$	-33.51	-19.34	-9.76
$(\Delta \chi_{zz} / H^2 \chi_{zz}) (10^{-12} \text{ cgs})$	-23.39	-13.50	-6.81
$\chi_{xyz} / T (10^{-6} \text{ cgs})$	-4.84	-6.13	-6.47

Tableau 39 - Magnéto-conductivité thermique et coefficient χ_{xy} dans le cas où $1/L = 1/L_i + 1/L_e$ et $n_a = 0$, calculés à partir des formules (IX.13), (IX.14) et (IX.16).

ρ (cm ⁻³)	10^{18}	1.9×10^{18}	4×10^{18}
$(\Delta \chi_{xx} / H^2 \chi_{xx}) (10^{-12} \text{ cgs})$	-44.81	-25.89	-14.18
$(\Delta \chi_{zz} / H^2 \chi_{zz}) (10^{-12} \text{ cgs})$	-31.27	-18.07	-9.90
$\chi_{xyz} / T (10^{-6} \text{ cgs})$	-5.18	-6.59	-7.10

Si n-Ge est compensé avec $n_a = 0.5 \rho$, les résultats sont donnés par les tableaux 40 et 41.

Tableau 40 - Magnéto-conductivité thermique et coefficient χ_{xyz} dans le cas où $L = L_e$, calculés à partir des formules (IX.13), (IX.14) et (IX.16).

ρ (cm ⁻³)	10^{18}	1.9×10^{18}	4.1×10^{18}	2.27×10^{19}
$(\Delta \chi_{xx} / H^2 \chi_{xx}) (10^{-12} \text{ cgs})$	-23.27	-13.41	-6.78	-1.06
$(\Delta \chi_{zz} / H^2 \chi_{zz}) (10^{-12} \text{ cgs})$	-16.27	-9.36	-4.73	-0.74
$\chi_{xyz} / T (10^{-6} \text{ cgs})$	-1.24	-1.73	-2.11	-2.70

Tableau 41 - Magnéto-conductivité thermique et coefficient χ_{xyz} dans le cas où $1/L = 1/L_i + 1/L_e$.

ρ (cm ⁻³)	10^{18}	1.9×10^{18}	4×10^{18}	3.27×10^{19}
$(\Delta \chi_{xx}/H^2 \chi_{xx})(10^{-12} \text{ cgs})$	-34.62	-18.52	-10.76	-1.95
$(\Delta \chi_{zz}/H^2 \chi_{zz})(10^{-12} \text{ cgs})$	-24.16	-12.93	- 7.51	-1.36
χ_{xyz}/T (10^{-6} cgs)	-1.36	-1.93	- 2.48	-2.32

Les figures 27 , 28 et 29 représentent l'ensemble des résultats .

D.2 - Cas où $n_o = \beta \rho^{1/3} - n_a$.

On prend toujours l'exemple de GaAs non compensé . La magnéto-conductivité thermique et le coefficient χ_{xyz} sont donnés par les deux tableaux suivants (cf. les figures 30 , 31 et 32) .

Tableau 42 - Magnéto-conductivité thermique et coefficient χ_{xyz} dans le cas où $L = L_e$.

ρ (cm ⁻³)	8×10^{18}	1.89×10^{19}	6.40×10^{19}	10^{20}
$(\Delta \chi_{xx}/H^2 \chi_{xx})(10^{-12} \text{ cgs})$	-52.57	-24.50	-8.27	-5.55
$(\Delta \chi_{zz}/H^2 \chi_{zz})(10^{-12} \text{ cgs})$	-33.44	-15.59	-5.26	-3.53
χ_{xyz}/T (10^{-6} cgs)	-11.01	-6.54	-3.04	-2.24

Tableau 43 - Magnéto-conductivité thermique et coefficient χ_{xyz} dans le cas où $1/L = 1/L_i + 1/L_e$.

ρ (cm ⁻³)	8×10^{10}	1.89×10^{19}	6.40×10^{19}	10^{20}
$(\Delta \chi_{xx}/H^2 \chi_{xx})(10^{-12} \text{ cgs})$	-95.45	-48.50	-19.18	-13.97
$(\Delta \chi_{zz}/H^2 \chi_{zz})(10^{-12} \text{ cgs})$	-60.44	-30.99	-12.19	- 8.88
χ_{xyz}/T (10^{-6} cgs)	-12.76	-7.71	-3.75	- 2.79

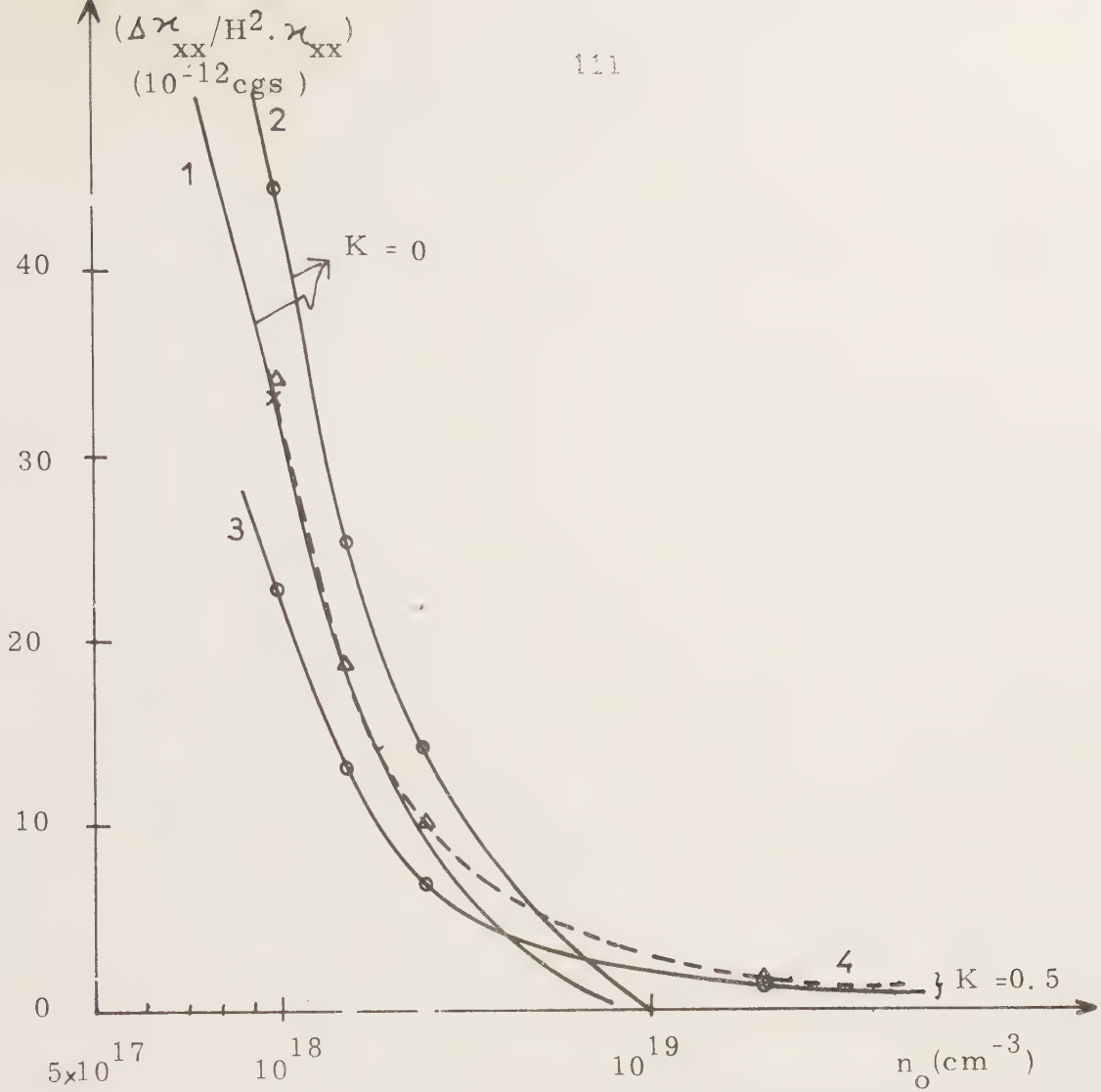


Fig. 27

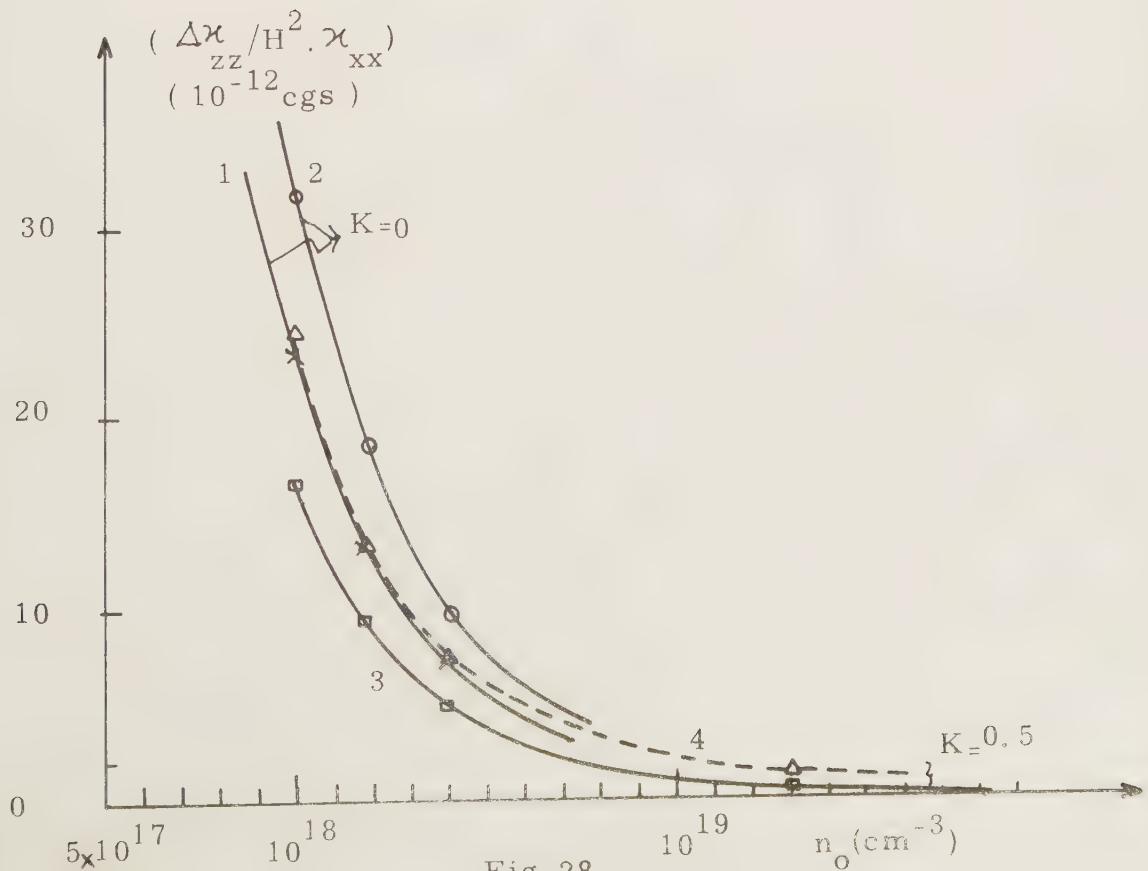


Fig. 28

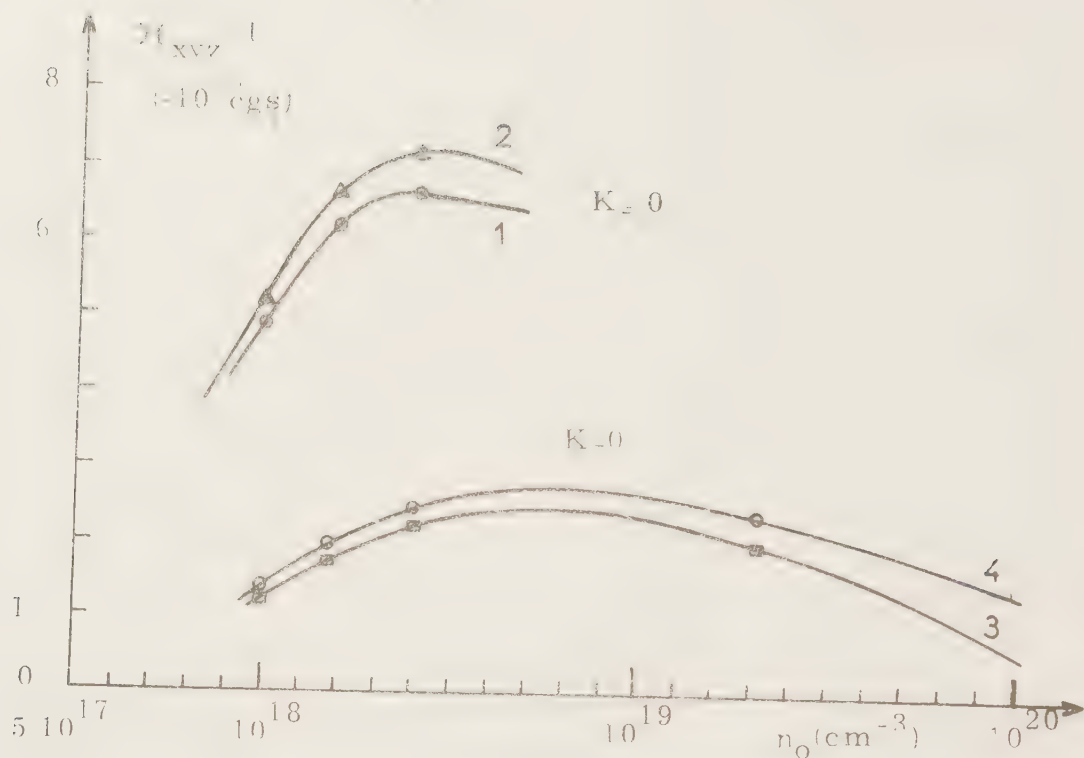


Fig. 29

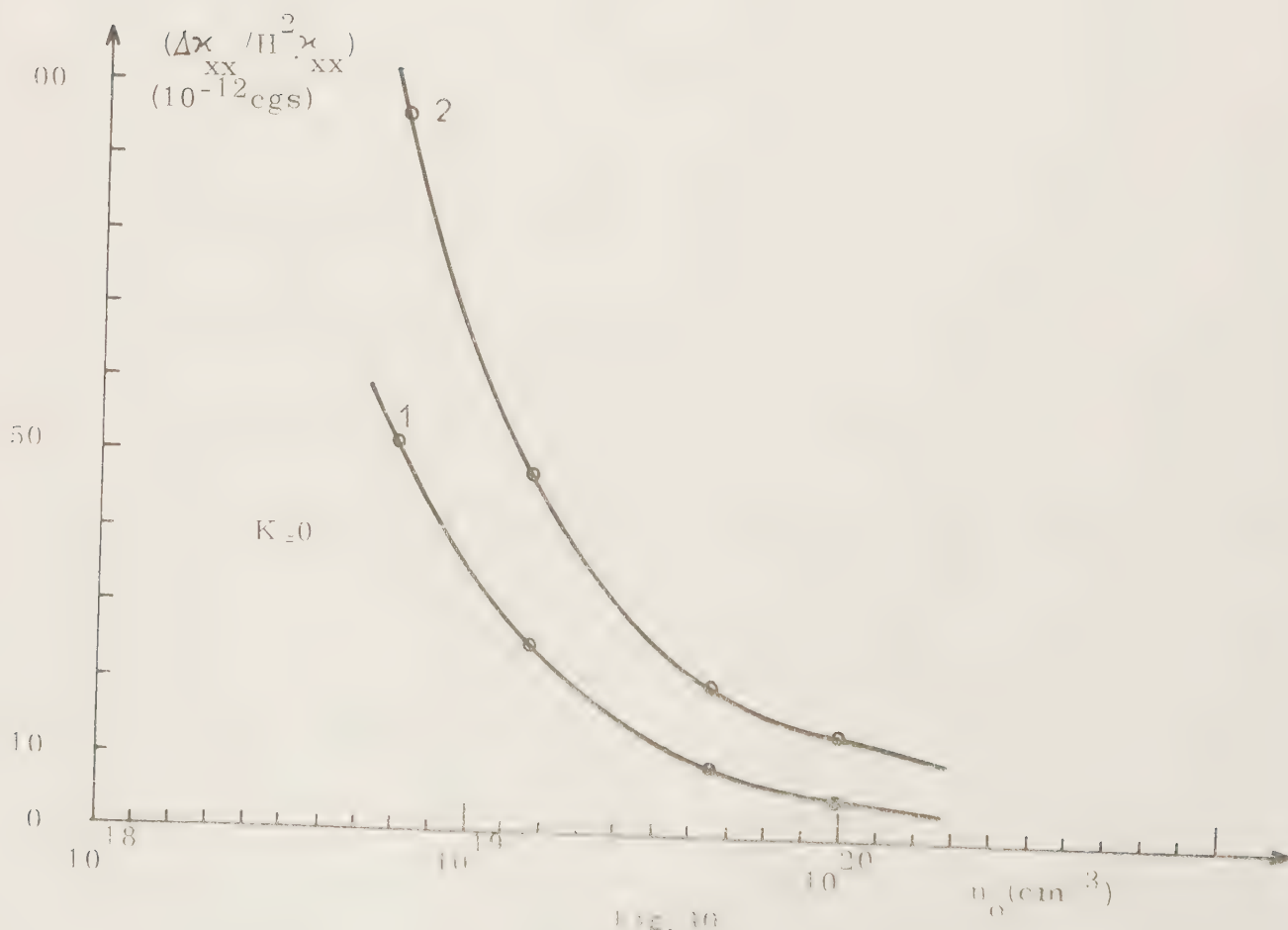


Fig. 30

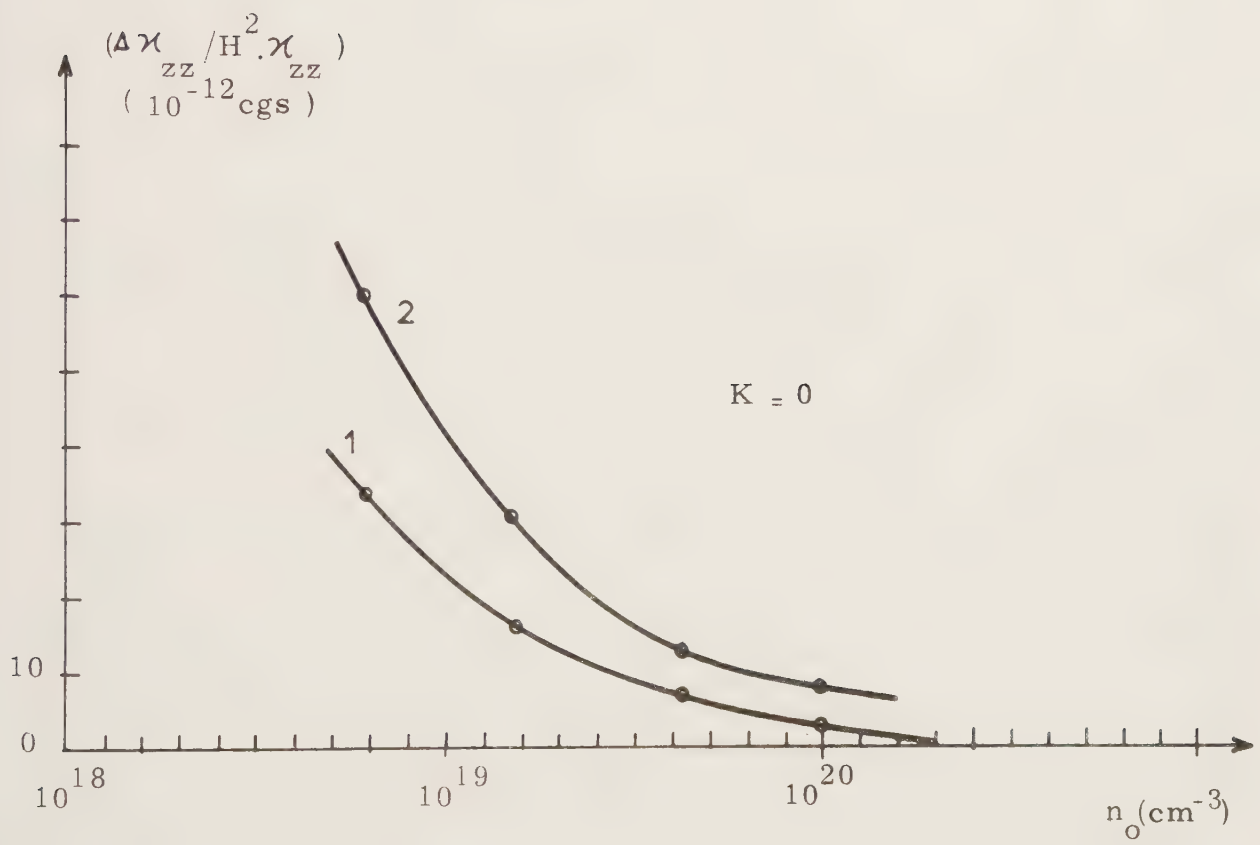
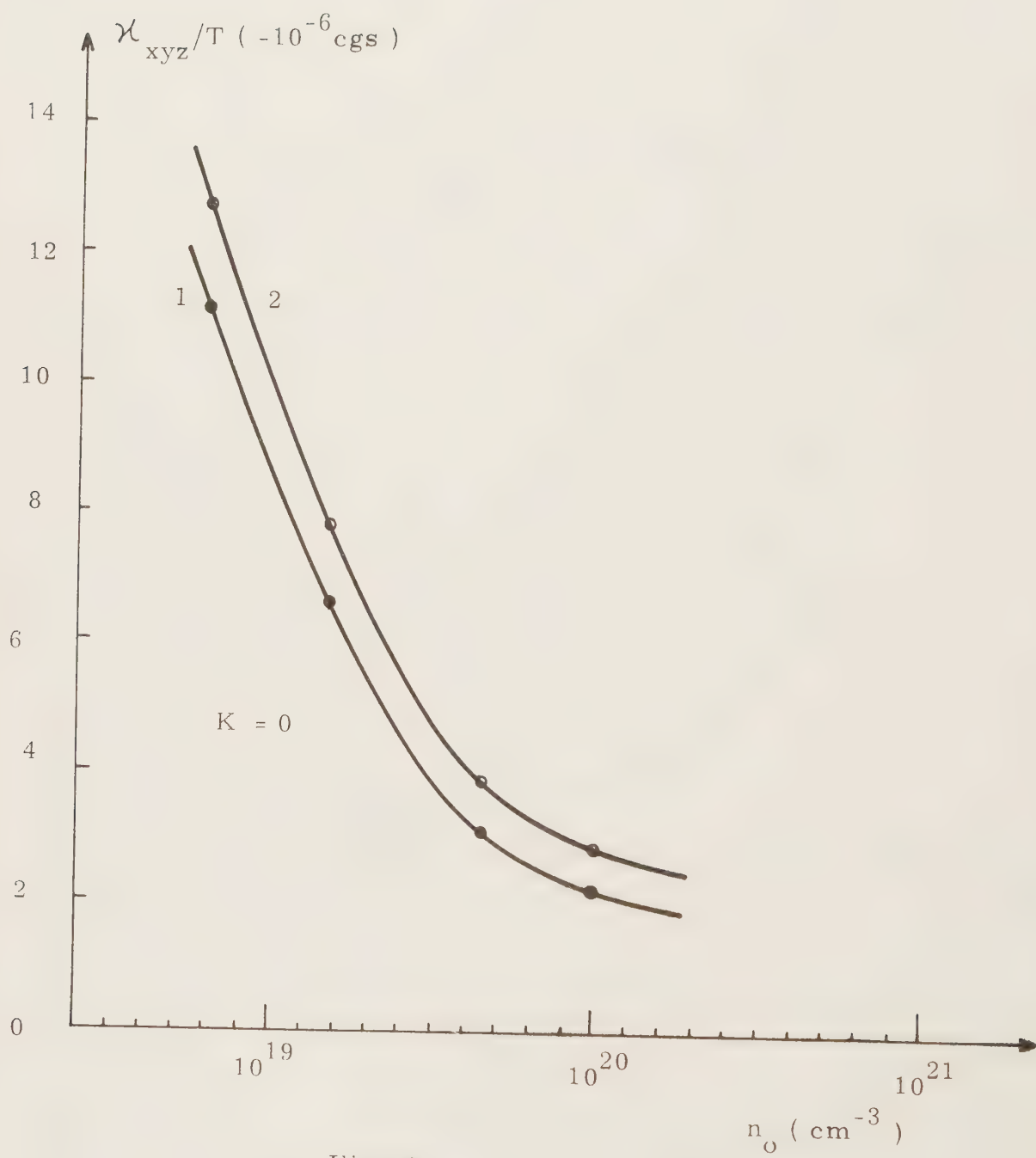


Fig . 31



X . Absorption optique près du seuil

A - Description de deux modèles de bandes .

Dans le présent chapitre , nous allons étudier l'absorption optique près du seuil des semi-conducteurs très dopés de type n dans un champ nul à basse température en utilisant la formule de Greenwood [97] . Le coefficient d'absorption optique est donné par

$$\alpha(\omega, T, \rho) = \frac{4\pi}{nc} \operatorname{Re} \sigma(\omega, T, \rho) ,$$

où n est l'indice de réfraction , c la vitesse de la lumière et $\operatorname{Re} \sigma$ la partie réelle de la conductivité électrique à la pulsation finie ω . La formule de Hindley [98] pour le coefficient d'absorption s'écrit

$$\alpha(\omega, T, \rho) = \frac{8\pi^2 e^2}{3\omega n c} |v_{VC}|^2 (2)^2 \int N_C(E) N_V(E_V) \{1 - f(E)\} dE , \quad (\text{X.1})$$

où v_{VC} est l'élément de matrice de l'opérateur de vitesse , entre les bandes de valence et de conduction , que l'on supposera constant , N_C et N_V les densités d'états pour un sens du spin dans les bandes de conduction et de valence et $E_V = E - \hbar\omega$.

Quand on introduit un nombre élevé de donneurs dans un cristal parfait semi-conducteur , les niveaux d'impuretés forment une bande d'impuretés qui , d'une part , se fond dans la bande de conduction et , d'autre part , est prolongée par une queue s'étendant dans la bande interdite . Les formules des densités d'états N_{C1} pour $|E/\sigma| < 1$ et N_{C2} pour $E < -\sigma$ s'écrivent respectivement (cf. les formules (II.37) et (II.39)) :

$$N_{C1} \approx \frac{1.79 (2 m_C^*)^{3/2}}{4\pi \hbar^3} \sqrt{\sigma} \left\{ 1 + 1.60 \left(\frac{E}{\sigma} \right) + 0.54 \left(\frac{E}{\sigma} \right)^2 - 0.23 \left(\frac{E}{\sigma} \right)^3 \right\} \quad \text{pour} \quad \left| \frac{E}{\sigma} \right| < 1 ,$$

(X.2)

et

$$N_{C_1} \approx \frac{(2 m_c^*)^{3/2} \sqrt{\sigma}}{4 \pi \hbar^3} \left(-\frac{E}{\sigma} \right)^{-3/2} \exp \left[-\left(\frac{E}{\sigma} \right)^2 \right] , \quad \text{avec } E < -\sigma \quad (\text{X. 3})$$

Nous nous proposons de préciser la structure de la bande de valence, en présence des donneurs ionisés en considérant les deux modèles suivants.

A.1 - Dans le premier, la bande de valence garde la forme parabolique, mais nous admettons que l'introduction des impuretés la décale d'une quantité vers le bas. Le même déplacement vers le bas intervient pour la bande de conduction avec le zéro d'énergie choisi (V_0). La valeur de V_0 a été calculée au chapitre II. La bande interdite "locale" reste la même partout. On a

$$N_{V_1} = \frac{(2 m_v^*)^{3/2}}{4 \pi^2 \hbar^3} (E_1 - E)^{1/2} , \quad (\text{X. 4})$$

où $E_1 = \hbar\omega - E_g$, E_g désignant la largeur de la bande interdite en l'absence des impuretés et N_{V_0} la densité d'états pour la bande de valence.

La forme des deux bandes de conduction et de valence introduit donc une dissymétrie (cf. Figure 33). Cette situation est physiquement analogue à celle que l'on rencontre avec une faible densité des donneurs avec un niveau d'impureté où l'on peut négliger l'influence des donneurs ionisés sur la bande de valence.

A.2 - Dans le second modèle, nous supposons que l'influence des donneurs ionisés est la même pour les deux bandes de conduction et de valence : un donneur ionisé exerce une force attractive sur un électron et une force répulsive sur un trou, la bande interdite "locale" reste encore la même partout (cf. Figure 34). Ce modèle est donc symétrique. Sous l'angle mathématique, cette situation résulte de l'approximation gaussienne dans laquelle la théorie repose sur le calcul du coefficient ϕ caractérisant les impuretés. Or, ce coefficient ne dépend que de $v^2(r)$ et la densité d'états est donc la même pour deux énergies potentielles de signes différents, étant entendu que le zéro de l'énergie E n'est pas le même. La situation pour les deux bords de bandes équivaut à ces deux cas, d'où la même loi pour les deux densités d'états des bandes de conduction et de valence, avec le même décalage V_0 vers

le bas par rapport au bord de bande en l'absence des impuretés ; mais les particules concernées ont des masses effectives différentes . On obtient ainsi , dans le second modèle , la densité d'états dans la bande de valence,

$$N_{v_1} \approx \frac{1.79 (2 m_V^*)^{3/2} \sqrt{\sigma}}{4 \pi \hbar^3} \left\{ 1 + 1.60 \left(\frac{E_1 - E}{\sigma} \right) + 0.54 \left(\frac{E_1 - E}{\sigma} \right)^2 - 0.28 \left(\frac{E_1 - E}{\sigma} \right)^3 \right\}, \quad \text{pour} \quad \left| \frac{E_1 - E}{\sigma} \right| < 1, \quad (X. 5)$$

et

$$N_{v_1} \approx \frac{(2 m_V^*)^{3/2} \sqrt{\sigma}}{4 \pi \hbar^3} \left(\frac{E - E_1}{\sigma} \right)^{-3/2} \exp \left[- \left(\frac{E - E_1}{\sigma} \right)^2 \right], \quad \text{pour} \quad (E - E_1) > \sigma. \quad (X. 6)$$

Nous allons calculer le coefficient d'absorption optique avec ces deux modèles .

B - Coefficient d'absorption pour le premier modèle .

Avec le premier modèle , l'équation (X.1) s'écrit

$$\alpha(\omega, T, \varrho) = c_1 \int_{-\infty}^{E_1} \Phi_{C_1 V_1} f_p(E) dE, \quad (X. 7)$$

où

$$c_1 = \frac{32 \pi^2 e^2 |v_{VC}|^2}{3 \omega n c}, \quad \Phi_{C_1 V_1} \equiv N_{C_1} N_{V_1}, \quad f_p(E) = 1 - f(E).$$

Nous distinguons ici deux gammes d'énergie : pour la première , on a $E_F < -\sigma$ (échantillon très compensé) et pour la seconde , on a $E_F > -\sigma$ (compensation partielle ou nulle) .

B.1 - Cas d'une forte compensation ($E_F < -\sigma$) . La densité d'états N_{C_1} près du bord de la bande est N_{C_2} . D'autre part , près du seuil optique où $E_1 \approx E_F$, N_{C_2} est approximativement linéaire en $(E - E_1)$ avec

$$N_{C_1} \approx -a(E_1)(E_1 - E) + b(E_1), \quad (\text{X. 8})$$

où

$$\begin{aligned} a(E_1) &= \left(\frac{dN_{C_1}}{dE} \right)_{E=E_1} = \frac{(2 m_V^*)^{3/2} \sqrt{\sigma}}{4 \pi \hbar^3} \left\{ \left(\frac{3}{2 \sigma} \right) \left(-\frac{E_1}{\sigma} \right)^{-5/2} + \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{2}{\sigma} \right) \left(-\frac{E_1}{\sigma} \right)^{-1/2} \right\} \exp \left[-\left(\frac{E_1}{\sigma} \right)^2 \right], \\ b(E_1) &= \frac{(2 m_V^*)^{3/2} \sqrt{\sigma}}{4 \pi \hbar^3} \left(-\frac{E_1}{\sigma} \right)^{-3/2} \exp \left[-\left(\frac{E_1}{\sigma} \right)^2 \right]. \end{aligned}$$

Dans cette approximation ,

$$\alpha(\omega, T, \varrho) = \int_{-\infty}^{E_1} g_{C_1 V_1}(E) f_V(E) dE, \quad (\text{X. 9})$$

$$g_{C_1 V_1}(E) = c_1 \frac{(2 m_V^*)^{3/2}}{4 \pi^2 \hbar^3} \{ -a(E_1)(E_1 - E)^{3/2} + b(E_1)(E_1 - E)^{1/2} \}.$$

Deux cas particuliers peuvent être précisés .

B.1.1 - Cas où $E_1 \approx E_F$ (cf. Figure 35a) . Posant $\eta = (E_1 - E_F)/(kT)$, le coefficient d'absorption (X. 9) est donné par

$$\alpha(\omega, T, \varrho) \approx (kT)^{5/2} A_1 \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) F_{3/2}(\eta) + (kT)^{3/2} A_2 \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) F_{1/2}(\eta).$$

Dans cette équation , $\mathcal{F}_j(\eta)$ est une intégrale de Fermi-Dirac [99] , pour laquelle différentes approximations sont possibles quand $|\eta|$ ne dépasse pas quelques unités (cf. Section B.2.1) ,

$$A_1 = -\frac{c_1 (2 m_V^*)^{3/2} a(E_1)}{4 \pi^2 \hbar^3} \quad \text{et} \quad A_2 = \frac{c_1 (2 m_V^*)^{3/2} b(E_1)}{4 \pi^2 \hbar^3}.$$

A une température suffisamment basse , le coefficient d'absorption optique est très faible .

B.1.2 - Cas où $E_F < E_1 < -\sigma$ (cf. Figure 35b) . A basse température , l'équation (X. 9) prend la forme approchée (cf. Appendice B)

$$\begin{aligned}
\alpha(\omega, T, \varrho) &\approx \int_{E_F}^{E_1} g_{c_1 v_s}(E) dE - \frac{(\pi kT)^2}{6} g'_{c_1 v_s}(E_F), \\
&\approx \frac{c_1 (2 m_{\text{c}}^*)^{3/2}}{4 \pi^2 \hbar^3} \left\{ -\frac{2 a(E_1)}{5} (E_1 - E_F)^{5/2} + \frac{2 b(E_1)}{3} (E_1 - E_F)^{3/2} \right\} - \\
&\quad - \frac{(\pi kT)^2}{6} c_1 \frac{(2 m_{\text{c}}^*)^{3/2}}{4 \pi^2 \hbar^3} \left\{ \frac{3 a(E_1)}{2} (E_1 - E)^{1/2} - \frac{b(E_1)}{2} (E_1 - E_F)^{1/2} \right\}. \quad (\text{X. 10})
\end{aligned}$$

B. 2 - Compensation partielle ou nulle ($E_F > \sigma$). Dans ce cas, la densité d'états N_{C_1} est identique à N_{C_1} . L'équation (X. 7) donne

$$\alpha(\omega, T, \varrho) = c_1 \int_{-\infty}^{E_1} N_{c_1} N_{v_s} f_p(E) dE. \quad (\text{X. 11})$$

Nous calculons séparément ce coefficient d'absorption près du seuil optique ($E_1 \approx E_F$) et pour $E_1 > E_F$.

B. 2. 1 - Cas où $E_1 \approx E_F$ (cf. Figure 36a). C'est la gamme où l'énergie E_1 et par suite E est de l'ordre de quelques unités de kT , comptée de l'énergie de Fermi E_F . Donc, N_{C_1} est considéré comme constant, d'où

$$g_{c_1 v_s}(E) \approx 8 c_2 \sqrt{\sigma} (E_1 - E)^{1/2},$$

avec

$$c_2 = c_1 \left\{ \frac{(2 m_{\text{c}}^*)^{3/2}}{4 \pi \hbar^3 \Gamma(3/4) \Gamma(1/4)} \right\} \left\{ \frac{(2 m_{\text{v}}^*)^{3/2}}{4 \pi^2 \hbar^3} \right\}.$$

L'équation (X. 11) peut être approchée par

$$\alpha(\omega, T, \varrho) \approx 8 c_2 \sqrt{\sigma} I, \quad (\text{X. 12})$$

où

$$I = \int_{-\infty}^{E_1} (E_1 - E)^{1/2} f_p(E) dE.$$

Cette intégrale ne peut être calculée exactement, mais nous remarquons que ce problème équivaut à la détermination du nombre des trous présents dans une bande normale quand l'énergie de Fermi est très près du sommet de la

bande de valence . Nous adoptons les résultats approchés résumés , pour ce problème , par Blakemore [99] . Posant $\eta = (E_1 - E_F)/(kT)$, nous obtenons les résultats suivants .

(i) Pour $E_1 < E_F$,

$$I \approx \frac{1}{9} (kT)^{3/2} \{ \exp(\eta) - 0.3 \exp(2\eta) + 0.06 \exp(3\eta) \} . \quad (X.13)$$

Donc ,

$$\alpha(\omega, T, \rho) \approx 4 \pi c_2 \bar{\sigma} (kT)^{3/2} \{ \exp(\eta) - 0.3 \exp(2\eta) + 0.06 \exp(3\eta) \} . \quad (X.14)$$

Pour η suffisamment négatif , l'équation (X.13) prend la forme approchée

$$\alpha(\omega, T, \rho) \approx 4 \pi c_2 \bar{\sigma} (kT)^{3/2} \exp(\eta) . \quad (X.15)$$

Le coefficient d'absorption est très faible pour une température suffisamment basse . Pour $E_1 = E_F$, on obtient , en posant $\eta = 0$ dans l'équation (X.13) , la valeur particulière

$$\alpha(\omega, T, \rho) \approx 4 \pi c_2 \bar{\sigma} (kT)^{3/2} \times 0.76 . \quad (X.16)$$

Cette valeur peut être choisie comme valeur au seuil de l'absorption optique . Ce seuil se déplace vers les faibles valeurs de ω quand la température T augmente , à cause des variations de E_g et E_F avec la température .

(ii) Pour $E_1 > E_F$,

$$I \approx \left(\frac{2}{3} \right) c_2 (kT)^{3/2} \left\{ 1 + \frac{1.15}{\eta^2} \right\} .$$

Donc ,

$$\alpha(\omega, T, \rho) \approx 0.33 c_2 \bar{\sigma} (E_1 - E_F)^{3/2} \left\{ 1 + 1.15 \left(\frac{kT}{E_1 - E_F} \right)^2 \right\} . \quad (X.17)$$

A une température suffisamment basse l'équation (X.17) peut s'écrire approximativement

$$\alpha(\omega, T, \rho) \approx 0.33 c_2 \bar{\sigma} (E_1 - E_0)^{3/2} , \quad (X.18)$$

où E_0 est l'énergie de Fermi pour $T = H = 0$.

B.2.2 - Cas où $E_1 > E_F$ (cf. Figure 36b) . Dans ce cas , $(E_1 - E_F)$ est au moins égal à quelques unités de kT . Le coefficient d'absorption à basse température s'exprime par

$$\alpha(\omega, T, \varrho) = \int_{-\infty}^{E_1} g_{c_1 v_s}(E) f_p(E) dE \approx \int_{-\infty}^{E_1} g_{c_1 v_s}(E) dE - \frac{(\pi kT)^2}{6} g'_{c_1 v_s}(E_F),$$

$$g_{c_1 v_s}(E) = c_1 N_{c_1} N_{v_s} \approx 8 c_2 \sqrt{\sigma} (E_1 - E)^{1/2} \times$$

$$\times \left\{ 1 + 1.60 \left(\frac{E}{\sigma} \right) + 0.54 \left(\frac{E}{\sigma} \right)^2 - 0.28 \left(\frac{E}{\sigma} \right)^3 \right\}, \quad \text{pour } |E/\sigma| < 1. \quad (\text{X. 19})$$

On a alors :

$$\alpha(\omega, T, \varrho) \approx 8 c_2 \sqrt{\sigma} (E_1 - E_F)^{3/2} \left\{ 1 + 0.64 \left(\frac{E_1}{\sigma} \right) + 0.14 \left(\frac{E_1}{\sigma} \right)^2 - 0.04 \left(\frac{E_1}{\sigma} \right)^3 + \right.$$

$$+ 0.17 \left(\frac{E_1}{\sigma} \right) \left(\frac{E_F}{\sigma} \right) - 0.06 \left(\frac{E_1}{\sigma} \right)^2 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right) - 0.09 \left(\frac{E_1}{\sigma} \right) \left(\frac{E_F}{\sigma} \right)^2 +$$

$$+ 0.96 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right) + 0.23 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right)^2 - 0.09 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right)^3 \left. \right\} + \frac{(\pi kT)^2 4 c_2 \sqrt{\sigma}}{6} \times$$

$$\times (E_1 - E_F)^{-1/2} \left\{ 1 + 1.60 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right) + 0.54 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right)^2 - 0.28 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right)^3 \right\} -$$

$$- \frac{(\pi kT)^2 (1.60 \times 8 c_2) (E_1 - E_F)^{1/2}}{6} \left\{ 1 + 0.67 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right) - 0.53 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right)^2 \right\}. \quad (\text{X. 20})$$

L'équation (X. 20) est valable pour une large gamme d'énergies de photons $\hbar\omega$ avec $E_1 = \hbar\omega - E_g > E_F$. Nous limitons notre problème à l'approximation où $|E_1 / \sigma| < 1$. Cet intervalle d'énergies E_1 définit l'absorption optique près du bord de la bande d'absorption. D'autre part, dans les chapitres précédents, la condition $|E_F / \sigma| < 1$ a été introduite. Avec ces approximations, le coefficient d'absorption près du bord de la bande s'écrit

$$\alpha(\omega, T, \varrho) \approx 8 c_2 \sqrt{\sigma} (E_1 - E_F)^{3/2} + \frac{(\pi kT)^2}{6} \times$$

$$\times \left\{ 4 c_2 \sqrt{\sigma} (E_1 - E_F)^{-1/2} - 12.8 c_2 \left(\frac{E_1 - E_F}{\sigma} \right)^{1/2} \right\}. \quad (\text{X. 21})$$

Tenant compte des équations (III. 12) et (III. 16), cette expression devient

$$\alpha(\omega, T, \varrho) \approx 8 c_2 A^{1/2} \varrho^{2/9} (E_1 - E_0)^{3/2} + 0.99 c_2 (\pi kT)^2 \times$$

$$\times \left\{ \left(\frac{E_1 - E_0}{A \varrho^{4/9}} \right)^{1/2} + 0.67 \left(\frac{A \varrho^{4/9}}{E_1 - E_0} \right)^{1/2} \right\}. \quad (\text{X. 22})$$

Nous remarquons que ce coefficient d'absorption varie approximativement comme $(\hbar\omega - (E_g + E_o))^{3/2}$. D'autre part, il décroît légèrement quand la température croît pour des valeurs données de ω et ρ .

C - Coefficient d'absorption pour le second modèle.

Comme dans la section B, nous étudions respectivement deux cas.

C.1 - Cas des fortes compensations ($E_F \rightarrow 0$). Le coefficient d'absorption est donné par

$$\alpha(\omega, T, \rho) = c_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_{c_1 v_j} f_p(E) dE. \quad (X.23)$$

Deux cas vont être précisés.

C.1.1 - Cas où $(E_1 + \sigma) < E_F$ (cf. Figure 37a). L'équation (X.23) devient

$$\alpha(\omega, T, \rho) = \alpha_1 + \alpha_2. \quad (X.24)$$

Dans cette équation, α_1 , à basse température, peut s'écrire approximativement

$$\begin{aligned} \alpha_1 &\approx c_1 \int_{\infty}^{-\sigma} \Phi_{c_1 v_j} f_p(E) dE, \\ &\approx \alpha'_1(E_F, E_1) - \frac{(\pi kT)^2}{6} c_1 \Phi'_{c_1 v_j}(E_F), \end{aligned} \quad (X.25)$$

où

$$\begin{aligned} \Phi'_{c_1 v_j}(E_F) &= \left[\left(-\frac{E_F}{\sigma} \right) \left(\frac{E_F - E_1}{\sigma} \right) \right]^{-3/2} \left\{ \frac{3}{2\sigma^2} \left[\left(-\frac{E_F}{\sigma} \right) \left(\frac{E_F - E_1}{\sigma} \right) \right]^{-1} - \frac{2}{\sigma^2} \right\} \times \\ &\times (2E_F - E_1) \exp \left[-\left(\frac{E_F}{\sigma} \right)^2 - \left(\frac{E_F - E_1}{\sigma} \right)^2 \right] \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} \alpha'_1(E_F, \sigma) &= c_1 \frac{(2m_c^*)^{3/2} (2m_v^*)^{3/2} \sigma}{(4\pi\hbar^3)^2} \int_{E_F}^{-\sigma} \left[\left(-\frac{E}{\sigma} \right) \left(\frac{E - E_1}{\sigma} \right) \right]^{-3/2} \times \\ &\times \exp \left[-\left(\frac{E}{\sigma} \right)^2 - \left(\frac{E - E_1}{\sigma} \right)^2 \right] dE. \end{aligned}$$

Si E_F est voisin de $-\sigma$, on peut remplacer dans l'intégrand la valeur de E par sa moyenne $(E_F - \sigma)/2$; on en déduit

$$\alpha_1' \approx c_1 \frac{(2 m_C^*)^{3/2} (2 m_V^*)^{3/2} \sigma}{(4 \pi \hbar^3)^2} \left[\frac{(\sigma - E_F)(E_F - \sigma - 2 E_1)}{4 \sigma^2} \right]^{-3/2} (-E_F - \sigma) \times \\ \times \exp \left[- \left(\frac{E_F - \sigma}{2 \sigma} \right)^2 - \left(\frac{E_F - \sigma - 2 E_1}{2 \sigma} \right)^2 \right].$$

D'autre part, α_2 est donné par

$$\alpha_2 = c_1 \int_{-\sigma}^{+\infty} \Phi_{C,V_1} dE = 4 \pi c_2 \sigma^2 \left\{ I \left[\left(-\frac{1}{4} \right); \left(\frac{-\sigma - E_1}{\sigma} \right)^2 \right] + \right. \\ + 1.6 \sum_{\mu=0}^1 \frac{c_1^\mu E_1^{1-\mu}}{\sigma^{1-\mu}} I \left[\left(\frac{\mu}{2} - \frac{1}{4} \right); \left(\frac{-\sigma - E_1}{\sigma} \right)^2 \right] + \\ + 0.54 \sum_{\mu=0}^2 \frac{c_2^\mu E_1^{2-\mu}}{\sigma^{2-\mu}} I \left[\left(\frac{\mu}{2} - \frac{1}{4} \right); \left(\frac{-\sigma - E_1}{\sigma} \right)^2 \right] - \\ \left. - 0.28 \sum_{\mu=0}^3 \frac{c_3^\mu E_1^{3-\mu}}{\sigma^{3-\mu}} I \left[\left(\frac{\mu}{2} - \frac{1}{4} \right); \left(\frac{-\sigma - E_1}{\sigma} \right)^2 \right] \right\}. \quad (X. 26)$$

Dans l'équation (X. 26), on a $|(-\sigma - E_1)/\sigma| > 1$ et l'on peut écrire [34]

$$I \left[\nu, \left(\frac{-\sigma - E_1}{\sigma} \right)^2 \right] \approx \left(\frac{-\sigma - E_1}{\sigma} \right)^{2\nu-2} \exp \left[- \left(\frac{\sigma + E_1}{\sigma} \right)^2 \right];$$

puis,

$$\alpha_2 \approx 4 c_2 \left(\frac{\sigma^2}{\pi} \right) \left(\frac{-\sigma - E_1}{\sigma} \right)^{-5/2} \exp \left[- \left(\frac{\sigma + E_1}{\sigma} \right)^2 \right] \times 0.22. \quad (X. 27)$$

C. 1. 2 - Cas où $E_F < E_1 + \sigma < -\sigma$ (cf. Figure 37b). On a ici

$$\chi(\omega, T, \varrho) = \alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_5, \quad (X. 28)$$

où

$$\alpha_3 = c_1 \int_{-\infty}^{E_1+\sigma} \Phi_{C,V_1} f_p(E) dE, \\ \approx c_1 \int_{E_F}^{E_1+\sigma} \Phi_{C,V_1} dE - \frac{(\pi kT)^2}{6} c_1 \Phi'_{C,V_1}(E_F), \\ \approx 4 c_2 \pi \sigma^2 \left\{ 0.22 \left(\frac{-\sigma - E_1}{\sigma} \right)^{-5/2} \exp \left[- \left(\frac{\sigma + E_1}{\sigma} \right)^2 \right] - \right. \\ - \left[\left(-\frac{E_F}{\sigma} \right)^{-5/2} \exp \left[- \left(\frac{E_F}{\sigma} \right)^2 \right] \left[1 + 1.60 \sum_{\mu=0}^1 \frac{c_1^\mu E_1^{1-\mu}}{\sigma} (-E_F)^\mu + \right. \right. \\ \left. \left. + 0.54 \sum_{\mu=0}^2 \frac{c_2^\mu E_1^{2-\mu}}{\sigma^2} (-E_F)^\mu - 0.28 \sum_{\mu=0}^3 \frac{c_3^\mu E_1^{3-\mu}}{\sigma^3} (-E_F)^\mu \right] \right\} - \\ - \frac{(\pi kT)^2}{\sigma} c_1 \Phi'_{C,V_1}(E_F), \quad (X. 29)$$

$$\alpha_4(E_1 + \sigma, -\sigma) = c_1 \int_{E_1 + \sigma}^{-\sigma} \Phi_{C_1 V_1} f_p(E) dE, \quad (X.30)$$

$\alpha_4(E_1 + \sigma, -\sigma)$ est obtenu en remplaçant E_F dans l'expression $\alpha_1'(E_F, -\sigma)$ par $(E_1 + \sigma)$ et

$$\alpha_5 = c_1 \int_{-\sigma}^{-\infty} \Phi_{C_1 V_1} dE \equiv \alpha_2, \quad (X.31)$$

C.1.3 - Cas où $E_1 + \sigma > -\sigma$ (cf. Figure 37c). Dans ce cas , le coefficient d'absorption est donné par

$$\alpha(\omega, T, \varrho) = \alpha_6 + \alpha_7 + \alpha_8, \quad (X.32)$$

où

$$\begin{aligned} \alpha_6 &= c_1 \int_{-\infty}^{-\sigma} \Phi_{C_1 V_1} f_p(E) dE, \\ &\approx c_1 \int_{E_F}^{-\sigma} \Phi_{C_1 V_1} dE - \frac{(\pi kT)^2 c_1}{6} \Phi'_{C_1 V_1}(E_F), \\ &\approx 4 c_2 \pi \sigma^2 \left\{ \left[\frac{1}{2.72} - \left(-\frac{E_F}{\sigma} \right)^{-5/2} \exp - \left(\frac{E_F}{\sigma} \right)^2 \right] + \right. \\ &\quad + 1.6 \sum_{\mu=0}^1 \frac{c_1^\mu E_1^{1-\mu}}{\sigma^{1-\mu}} \left[\frac{1}{2.76} - \left(-\frac{E_F}{\sigma} \right)^{\mu-5/2} \exp - \left(\frac{E_F}{\sigma} \right)^2 \right] + \\ &\quad + 0.54 \sum_{\mu=0}^2 \frac{c_2^\mu E_1^{2-\mu}}{\sigma^{2-\mu}} \left[\frac{1}{2.72} - \left(-\frac{E_F}{\sigma} \right)^{\mu-5/2} \exp - \left(\frac{E_F}{\sigma} \right)^2 \right] - \\ &\quad - 0.28 \sum_{\mu=0}^3 \frac{c_3^\mu E_1^{3-\mu}}{\sigma^{3-\mu}} \left[\frac{1}{2.72} - \left(-\frac{E_F}{\sigma} \right)^{\mu-5/2} \exp - \left(\frac{E_F}{\sigma} \right)^2 \right] \left. \right\} - \\ &\quad - \frac{(\pi kT)^2}{6} c_1 \Phi'_{C_1 V_1}(E_F), \end{aligned} \quad (X.33)$$

$$\begin{aligned} \alpha_7 &= c_1 \int_{-\sigma}^{E_1 + \sigma} \Phi_{C_1 V_1} dE = 8 \times 1.79 C_2 \pi \sigma \left[E - 0.49 \frac{E^3}{\sigma^2} + 0.24 \frac{E^5}{\sigma^4} + \right. \\ &\quad + 1.6 \frac{E_1 E}{\sigma} + 0.54 \frac{E_1^2 E}{\sigma^2} - 0.28 \frac{E_1^3 E}{\sigma^3} + 0.74 \frac{E_1 E^2}{\sigma^2} + \\ &\quad \left. + 0.85 \frac{E_1^2 E^2}{\sigma^3} + \dots \right]_{-\sigma}^{E_1 + \sigma}, \end{aligned} \quad (X.34)$$

et

$$\alpha_s = c_1 \int_{E_1 + \sigma}^{+\infty} \Phi_{C_1 V_1} dE ,$$

$$\approx 4.2 c_2 \sigma^2 \left\{ 1 + 0.64 \left(\frac{E_1}{\sigma} \right) - 0.10 \left(\frac{E_1}{\sigma} \right)^2 - 0.09 \left(\frac{E_1}{\sigma} \right)^3 \right\} . \quad (X. 35)$$

C. 2 - Compensation partielle ou nulle ($E_F > -\sigma$) . Dans ce cas , la densité d'états N_{C_1} est identique à N_{C_1} . L'équation (X. 23) devient

$$\alpha(\omega, T, \varrho) = c_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_{C_1 V_1} f_p(E) dE . \quad (X. 36)$$

Nous considérons deux cas .

C. 2.1 - Cas où $E_1 + \sigma < E_F$ (cf. Figure 38a) . On a

$$\alpha(\omega, T, \varrho) = c_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_{C_1 V_1} f_p(E) dE \approx c_1 \int_{E_F}^{+\infty} \Phi_{C_1 V_1} dE - \frac{(\pi kT)^2}{6} c_1 \Phi'_{C_1 V_1}(E_F) \approx$$

$$\approx 4 \pi c_2 \sigma^2 \left(\frac{E_F - E_1}{\sigma} \right)^{-5/2} \exp - \left(\frac{E_F - E_1}{\sigma} \right)^2 \left\{ 1 + 1.6 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right) + \right.$$

$$\left. + 0.54 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right)^2 - 0.28 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right)^3 \right\} - \frac{(\pi kT)^2}{6} c_1 \Phi'_{C_1 V_1}(E_F) ,$$

où

$$c_1 \Phi'_{C_1 V_1}(E_F) = 8 \pi c_2 \sigma \{ u'(E_F) v(E_F) + u(E_F) v'(E_F) \}$$

avec

$$u(E_F) = \left(\frac{E_F - E_1}{\sigma} \right)^{-3/2} \exp - \left(\frac{E_F - E_1}{\sigma} \right)^2 ,$$

$$v(E_F) = 1 + 1.60 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right) + 0.54 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right)^2 - 0.28 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right)^3 ,$$

$$u'(E_F) = \left(-\frac{1}{\sigma} \right) \exp - \left(\frac{E_F - E_1}{\sigma} \right)^2 \left\{ 3 \left(\frac{E_F - E_1}{\sigma} \right)^{-5/2} + 2 \left(\frac{E_F - E_1}{\sigma} \right)^{-1/2} \right\} ,$$

et

$$v'(E_F) = \left(\frac{1}{\sigma} \right) \left\{ 1.6 + 1.08 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right) - 0.84 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right)^2 \right\} .$$

Tenant compte des équations (III. 12) , (III. 16) et de la condition $|E_F / \sigma| < 1$, on obtient

$$\begin{aligned}
\alpha(\omega, T, \rho) \approx & 4 \pi c_2 A^2 \rho^{8/9} \left(\frac{E_0 - E_1}{A \rho^{4/9}} \right)^{-5/2} \exp - \left(\frac{E_0 - E_1}{A \rho^{4/9}} \right)^2 \\
& + 1.68 \pi c_2 A^2 \rho^{8/9} \left(\frac{\pi k T}{A \rho^{4/9}} \right)^2 \left[\exp - \left(\frac{E_0 - E_1}{A \rho^{4/9}} \right)^2 \right] \times \\
& \times \left\{ 1.38 \left(\frac{E_0 - E_1}{A \rho^{4/9}} \right)^{-5/2} - 1.27 \left(\frac{E_0 - E_1}{A \rho^{4/9}} \right)^{-3/2} + \right. \\
& \left. + 2.67 \left(\frac{E_0 - E_1}{A \rho^{4/9}} \right)^{-1/2} \right\}.
\end{aligned} \tag{X. 37}$$

On remarque que , pour ce second modèle et près du seuil de l'absorption optique , le coefficient d'absorption varie approximativement comme $\exp - \left(\hbar\omega - (E_g + E_0) \right)^2 / (A\rho^{4/9})^2$. D'autre part , il croît avec la température pour des valeurs données de ω et ρ ; ceci est dû à l'influence directe de la température et à la variation de E_g avec la température .

C.2.2 - Cas où $(E_1 + \sigma) > E_F$ (cf. Figure 38b) . Dans ce cas , on a :

$$\alpha(\omega, T, \rho) = \alpha_9 + \alpha_{10}, \tag{X. 38}$$

où

$$\begin{aligned}
\alpha_9 = & c_1 \int_{-\infty}^{E_1 + \sigma} \Phi_{c_1 v_1} f_p(E) dE \approx c_1 \int_{E_F}^{E_1 + \sigma} \Phi_{c_1 v_1} dE - \frac{(\pi k T)^2}{6} c_1 \Phi'_{c_1 v_1}(E_F) \approx \\
\approx & 7.30 \pi c_2 \sigma (E_1 + \sigma - E_F) \left\{ 1 + 2.66 \left(\frac{E_1}{\sigma} \right) + 1.55 \left(\frac{E_1}{\sigma} \right)^2 + 1.12 \left(\frac{E_1}{\sigma} \right)^3 + \right. \\
& + 0.49 \left(\frac{E_1}{\sigma} \right) \left(\frac{E_F}{\sigma} \right) + 1.66 \left(\frac{E_1}{\sigma} \right)^2 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right) - 0.96 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right) + \dots \left. \right\} - \\
& - \frac{(\pi k T)^2}{6} \Phi'_{c_1 v_1}(E_F).
\end{aligned} \tag{X. 39}$$

avec

$$\begin{aligned}
 c_1 \Phi_{C_1 V_1}(E_F) &= 8 \times 1.79 \pi c_2 \sigma (u'(E_F) v(E_F) + u(E_F) v'(E_F)), \\
 u(E_F) &= 1 + 1.6 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right) + 0.54 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right)^2 - 0.28 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right)^3, \\
 v(E_F) &= 1 + 1.6 \left(\frac{E_1 - E_F}{\sigma} \right) + 0.54 \left(\frac{E_1 - E_F}{\sigma} \right)^2 - 0.28 \left(\frac{E_1 - E_F}{\sigma} \right)^3, \\
 u'(E_F) &= \left(\frac{1}{\sigma} \right) \left\{ 1.6 + 1.08 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right) - 0.84 \left(\frac{E_F}{\sigma} \right)^2 \right\}, \\
 v'(E_F) &= \left(-\frac{1}{\sigma} \right) \left\{ 1.6 + 1.08 \left(\frac{E_1 - E_F}{\sigma} \right) - 0.84 \left(\frac{E_1 - E_F}{\sigma} \right)^2 \right\}, \\
 \alpha_{10} &= c_1 \int_{E_1 + \sigma}^{\infty} \Phi_{C_1 V_1} dE \approx 4.24 \pi c_2 \sigma^2 \times \\
 &\quad \times \left\{ 1 + 0.64 \left(\frac{E_1}{\sigma} \right) - 0.10 \left(\frac{E_1}{\sigma} \right)^2 - 0.09 \left(\frac{E_1}{\sigma} \right)^3 \right\}.
 \end{aligned}$$

(X. 40)

Pour $(E_1 + \sigma) > E_F$, on obtient, en tenant compte des équations (III. 12), (III. 16) et des conditions $|E_F/\sigma| < 1$ et $|E_1/\sigma| < 1$,

$$\begin{aligned}
 \alpha(\omega, T, \rho) &\approx 7.30 \pi c_2 A \varrho^{4/9} (E_1 - E_0) \left[1 + 0.05 \left(\frac{\pi k T}{A \varrho^{4/9}} \right)^2 + 0.26 \frac{(\pi k T)^2}{A \varrho^{4/9} (E_1 - E_0)} \right] + \\
 &+ 11.54 \pi c_2 A^2 \varrho^{8/9} \left\{ 1 + 0.10 \left(\frac{\pi k T}{A \varrho^{4/9}} \right)^2 \right\}.
 \end{aligned}$$

(X. 41)

Dans ce cas, le coefficient d'absorption varie linéairement avec ω .

D'autre part, il croît avec la température pour des valeurs données de ω et de ρ .

D - Discussion.

Nous avons calculé qualitativement le coefficient d'absorption des semi-

-conducteurs fortement et partiellement compensés de type n pour les deux modèles . Mais , on doit noter que lorsque la compensation est importante l'effet de diffusion des électrons par les centres chargés et l'effet d'écran des électrons cessent d'être bien représentés par le modèle adopté; d'une façon générale un modèle "métallique" ne convient plus . C'est pourquoi nous ne discuterons pas en détail le cas des fortes compensations ($E_F < -\sigma$) . Nous allons d'ailleurs centrer la discussion sur le cas d'une compensation nulle où $n_0 = p$.

Dans un semi-conducteur de type n , la bande interdite optique correspond à des transitions du sommet de la portion parabolique de la bande de valence au niveau de Fermi dans la bande de conduction . Pour le modèle dans lequel la bande de valence est parabolique (premier modèle) , il n'y a pas d'ambiguïté ; la bande interdite optique est donnée par

$$\hbar\omega = E_g + E_F . \quad (X.42)$$

D'autre part , le coefficient d'absorption pour le second modèle est largement différent du zéro à $\hbar\omega = E_g + E_F$, de sorte que cette valeur ne correspond pas strictement à la notion de bande interdite optique . On peut toutefois conserver cette définition par convention , ou bien on peut choisir une valeur α_0 de $\alpha(\omega, T, p)$ avec E_1 voisin de E_F , et calculer $\hbar\omega$ pour cette valeur α_0 .

Nous allons préciser deux cas particuliers .

D.1 - Germanium . On a , en unités cgs : $p < 3 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, $A = 13.42 \times 10^{-23}$; $P = 5 \times 10^{75/2}$ et $\alpha^* = 0.28 \times 10^{-6}$ avec $\xi = 16$, $m_C^* = 0.22m_0$ et $E_g = 1.2 \times 10^{-12}$ erg (ou 0.75ev) au zéro absolu ; d'autre part , E_0 et σ sont obtenus à partir des expressions (III.16) et (III.20) (cf. le tableau 44) .

Tableau 44 - Valeurs de E_0 et σ pour quelques valeurs de p dans le cas où $L = L_e$.

ρ (cm ⁻³)	2.4×10^{18}	1.9×10^{19}	2.3×10^{19}	4.3×10^{19}
E_o (mev)	0.335	12.400	15.220	28.260
σ (mev)	12.320	31.080	38.810	44.540

Pour comparer les valeurs théoriques et expérimentales du coefficient d'absorption, nous déterminons d'abord la constante c_2 introduite dans les formules précédentes. On a

$$c_2 \approx c_1 [(2m_c^*)^2] / [4\pi^3 \hbar^6 \Gamma(3/4) \Gamma(1/4)] , \quad \text{avec} \quad c_1 = (32\pi^2 e^2) / (3\omega n c) |v_{vc}|^2,$$

c_1 est relié approximativement au paramètre B^2 (cm⁻¹ erg⁻²) déduit des mesures de Haas 13 :

$$8 B^2 / \pi \approx c_1 (2m_c^*)^3 / (4\pi^2 \hbar^3)^2.$$

On trouve $c_2 \approx 1.91 B^2$. Cette valeur de c_2 peut être ajustée pour obtenir le meilleur accord entre la théorie et l'expérience. Pour les densités d'impuretés considérées, nous choisissons B^2 en adoptant le résultat de Haas pour $\rho \approx 10^{19}$ cm⁻³. On obtient

$$c_2 \approx 1.91 \times 0.39 \times 10^{27} \text{ cm}^{-1} \text{ erg}^{-2}.$$

Avec cette valeur de c_2 , les courbes du coefficient d'absorption optique ont été tracées pour $\rho = 2.4 \times 10^{18}$, 1.9×10^{19} , 2.3×10^{19} et 4.3×10^{19} cm⁻³ avec les deux modèles précédents (cf. Figures 39 et 40).

Les courbes de la figure 39 sont obtenues à partir des équations (X.16) pour le seuil optique ($E_1 = E_F$), et (X.22) pour $E_1 > E_F$ à $T = 4.2^\circ\text{K}$. La bande interdite optique pour le premier modèle dans le germanium de type n est représentée en fonction de ρ sur la figure 41. On voit qu'elle croît avec le dopage ρ (ou la densité des électrons n_o) (cf. les points (Δ) de la figure 41).

D'autre part, les courbes de la figure 40 sont obtenues à partir des équations (X.37) pour $(E_1 + \sigma) < E_F$ et (X.41) pour $(E_1 + \sigma) > E_F$ à $T = 4.2^\circ\text{K}$. Pour $E_1 \approx E_F$, nous choisissons $\alpha(\omega, T, \rho) = \alpha_o = 16 \text{ cm}^{-1}$ c'est-

-à-dire $(\alpha_o)^{1/2} = 4 \text{ cm}^{-1/2}$; la bande interdite optique obtenue ainsi en fonction de ρ présente un minimum peu accusé (cf. les points (•) de la figure 41).

On peut comparer ces résultats avec les résultats expérimentaux de Pankove et Aigrain [14] (cf. les points (x) de la figure 41). Il apparaît que le second modèle rend bien compte des résultats expérimentaux (le meilleur ajustement serait obtenu avec une bande interdite de 0.76 ev au zéro absolu).

Ces résultats ont été obtenus dans le cas où l'effet d'écran est dû uniquement aux électrons .

En présence de l'effet d'écran dû aux ions (cf. le chapitre III), l'effet d'écran global s'écrit $1/L = 1/L_i + 1/L_e$. Tenant compte de cette modification de la longueur d'écran , les quantités E_o et σ sont modifiées conformément au tableau 45 .

Tableau 45 - Valeurs de E_o et σ pour quelques valeurs de ρ dans le cas où $1/L = 1/L_i + 1/L_e$.

$\rho \text{ (cm}^{-3} \text{)}$	2.4×10^{18}	1.9×10^{19}	2.3×10^{19}	4.3×10^{19}
$E_o \text{ (mev)}$	0.270	9.079	9.190	16.930
$\sigma \text{ (mev)}$	10.000	22.810	23.440	26.870

Dans le cadre de cette modification , la bande interdite optique pour le premier modèle diminue légèrement tandis que pour le second modèle elle est augmentée et coïncide pratiquement avec la courbe expérimentale donnée sur la figure 41 . Le second modèle est donc toujours celui qui s'accorde avec l'expérience .

D.2 - Arséniure de gallium . On obtient en unités cgs (avec $\rho < 2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) : $A = 22.48 \times 10^{-23}$, $P = 10^{75/2}$ et $\alpha^* = 0.58 \times 10^{-6}$ avec $\epsilon = 12.5$, $m_C^* = 0.072 m_0$ et $E_g = 16.006 \times 10^{-12} \text{ erg}$ (ou 1.51 ev) au zéro absolu .

On remarque la loi $n_o = \rho$ dans le cas où il n'y a pas de compensation est valable seulement si ρ n'est pas très élevée [15, 89] .

Tableau 46 - Valeurs de E_o et σ pour quelques valeurs de ρ dans le cas où $L = L_e$.

$\rho \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	3.5×10^{17}	3×10^{18}	6.8×10^{18}
$E_0 \text{ (mev)}$	0.547	11.294	24.935
$\sigma \text{ (mév)}$	8.830	22.900	33.020

Dans ce cas , nous ne connaissons pas la constante c_2 des formules précédentes; toutefois , nous avons tracé les courbes donnant $\alpha (\hbar\omega) / (c_2 \times 10^{-27})$ en fonction de $\hbar\omega$ à $T = 5^\circ \text{K}$ pour diverses valeurs de $\rho = 3.5 \times 10^{17}$, 3×10^{18} et $6.8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (cf. Figure 42, 43).

La bande interdite optique est définie en choisant une valeur α_0 de $\alpha (\hbar\omega)$. La comparaison entre les résultats théoriques et expérimentaux est donnée sur la figure 44 , avec le premier modèle , qui s'avère être le meilleur pour expliquer l'absorption près du bord de la bande de l'arséniure de gallium de type n . La valeur c_2 a été choisie égale à 11×10^{30} en identifiant la valeur du coefficient d'absorption $10^{-29} c_2$ du modèle à la valeur expérimentale 110 cm^{-1} [15] . Avec ce modèle , la bande interdite optique s'élargit quand le dopage augmente . La bande interdite optique de l'arséniure de gallium très dopé est donc plus élevée que celle du semi-conducteur pur .

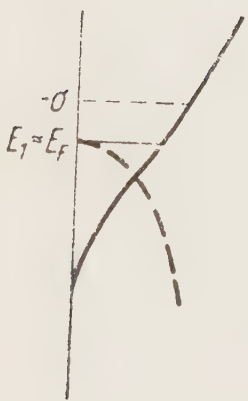
Les comportements différents de Ge et GaAs peuvent résulter du fait que , dans le premier cas , des niveaux donneurs sont situés près du bord de la bande de conduction de sorte que l'influence principale des impuretés sur la densité d'états vient de l'énergie potentielle due aux impuretés ionisées , tandis que , dans le second cas , des niveaux donneurs plus profonds apparaissent [89] , de sorte que la "queue" de la densité d'états serait plus importante pour la bande de conduction que pour la bande de valence .



Fig. 33



Fig. 34

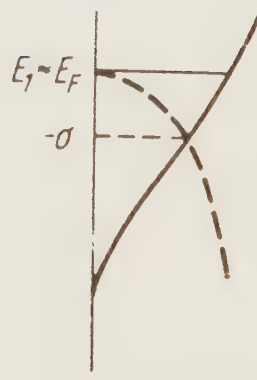


(a)

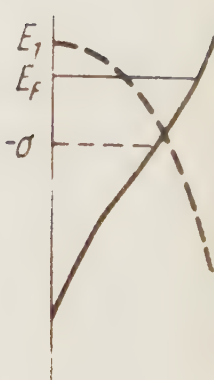


(b)

Fig. 35



(a)



(b)

Fig. 36

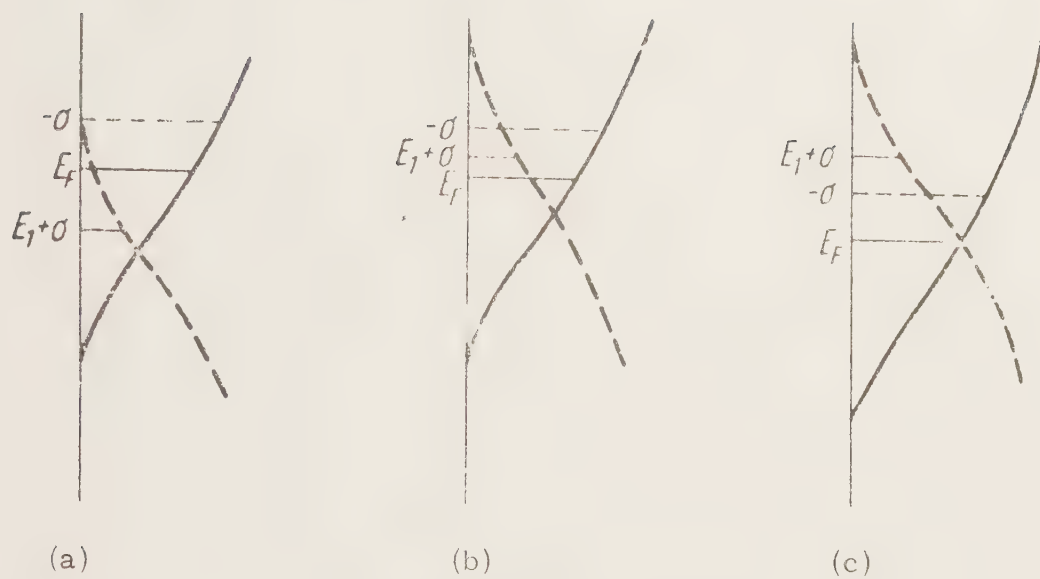


Fig. 37

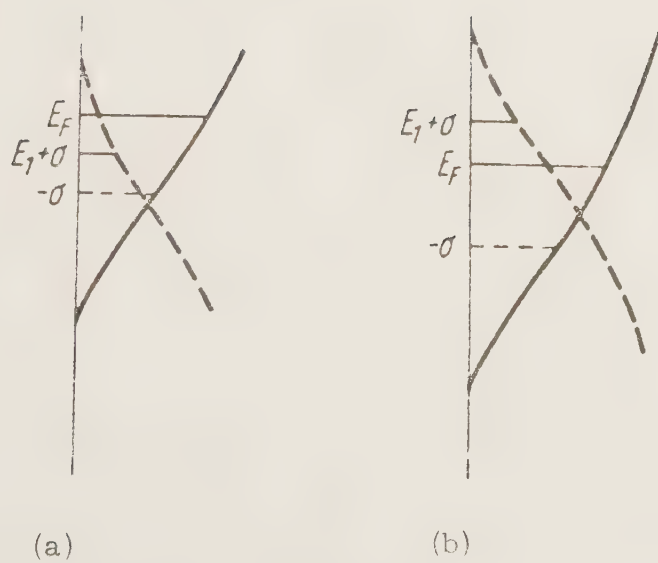


Fig. 38

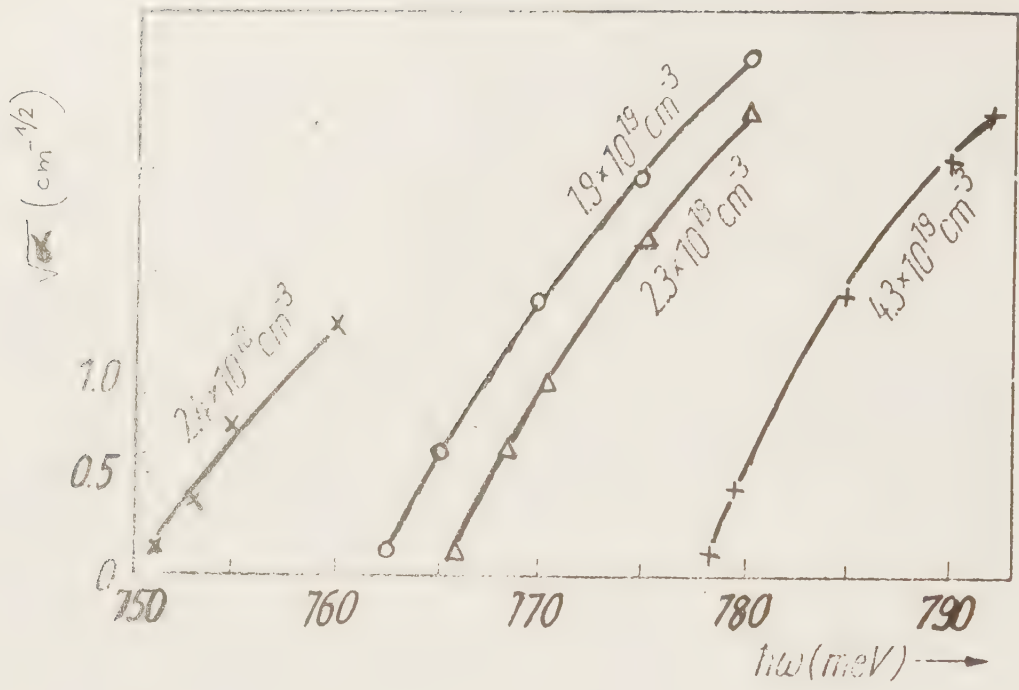


Fig. 39

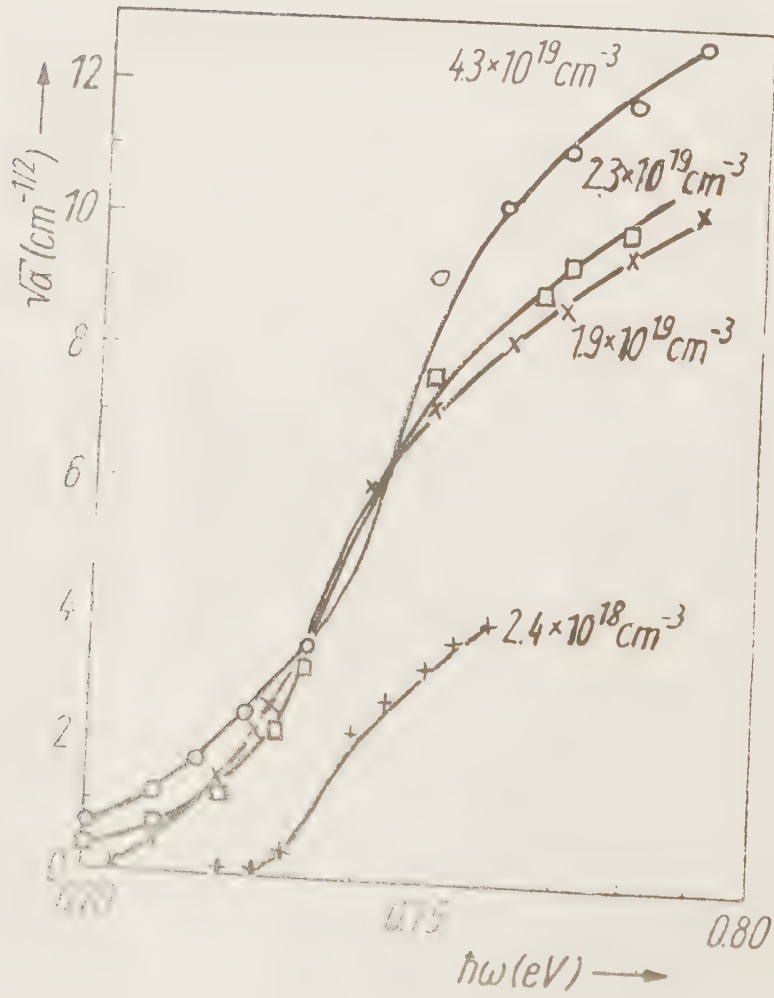


Fig. 40

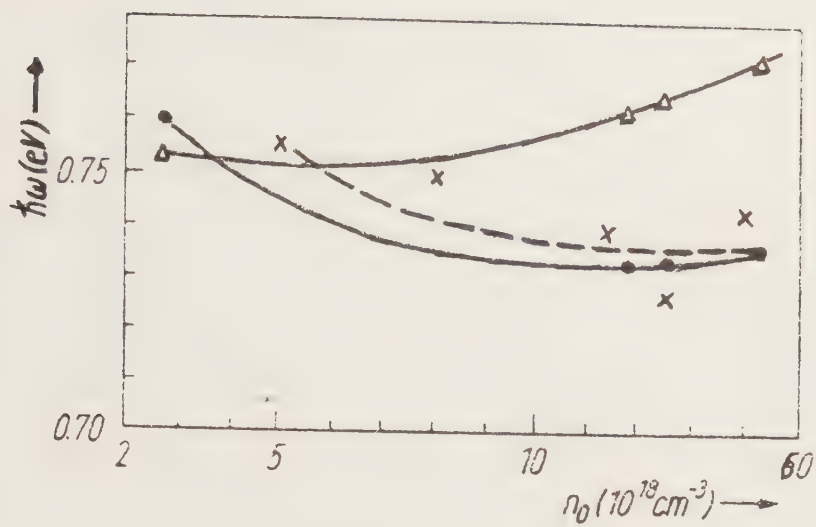


Fig. 41

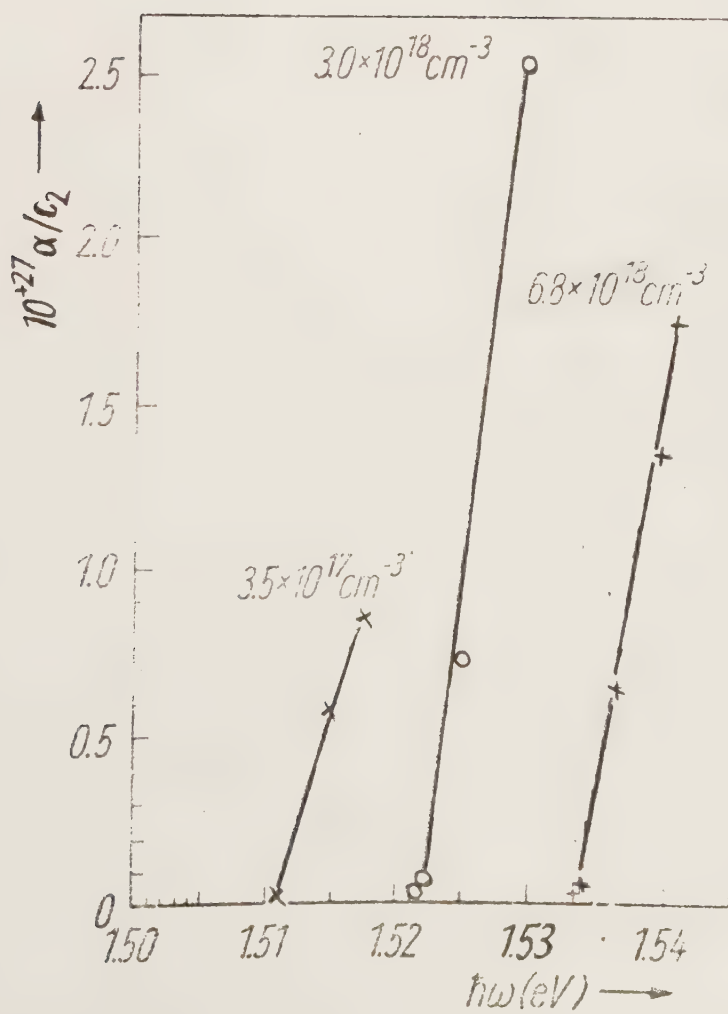


Fig. 42

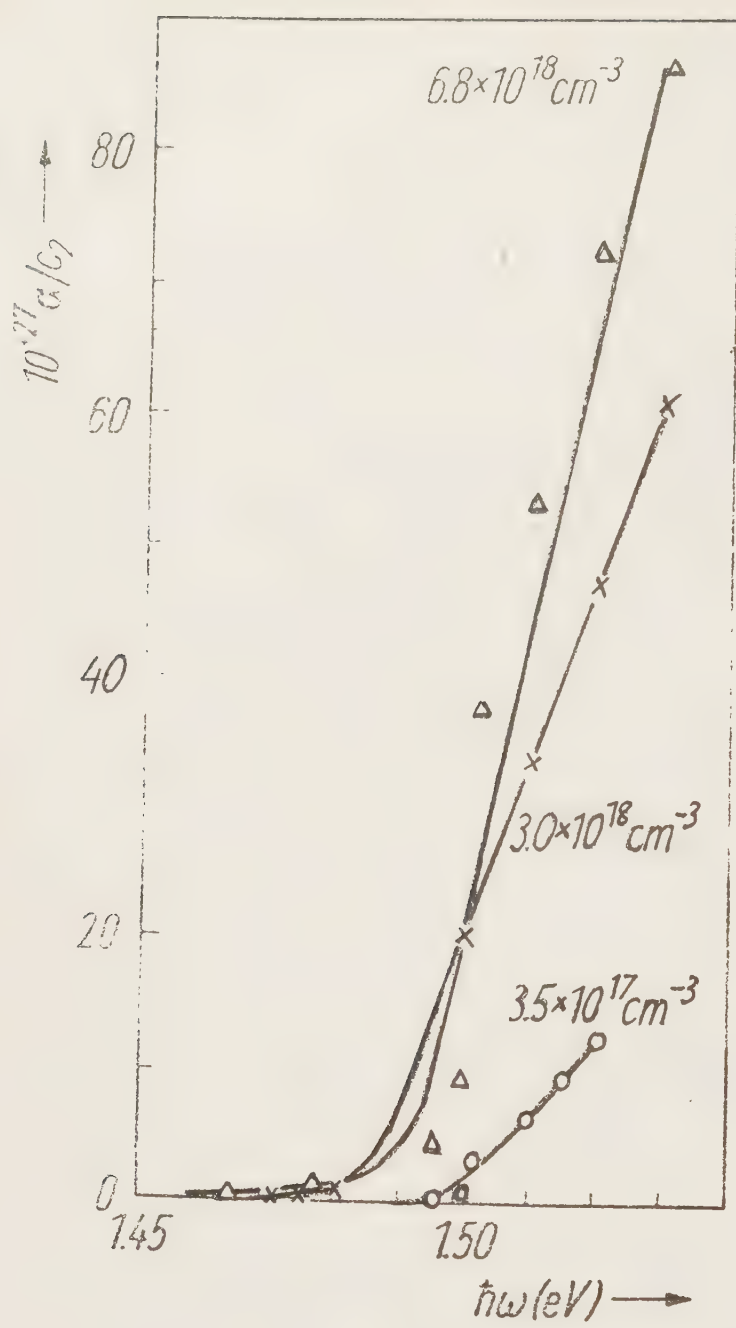


Fig. 43

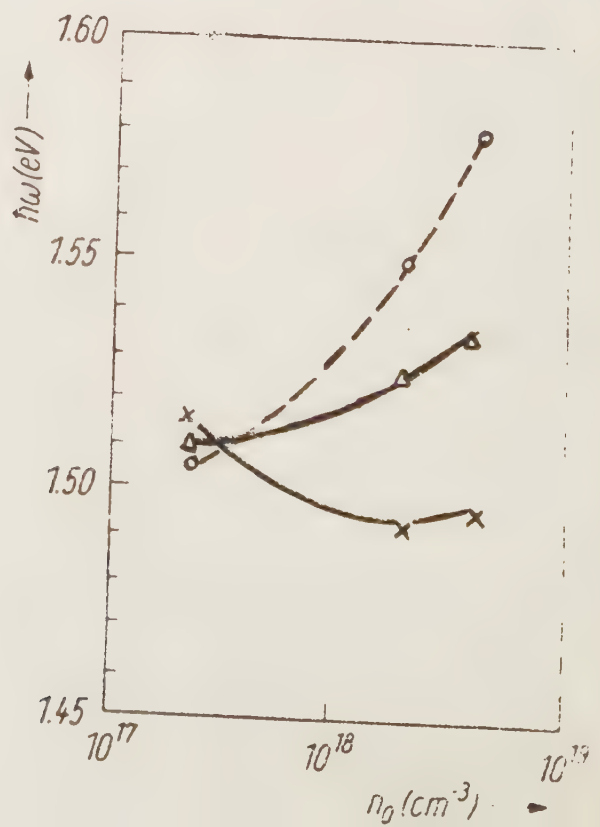


Fig. 44

XI. Conclusion

Nous avons développé une méthode d'étude des états électroniques utilisant les fonctions de Green et l'intégrale de parcours de Feynman et nous l'avons appliquée en vue de l'étude des propriétés électroniques des semi-conducteurs très dopés par des donneurs non ou partiellement compensés par des accepteurs, en utilisant un modèle simplifié dans lequel on n'a considéré que l'interaction entre un électron et une impureté ionisée par une énergie potentielle attractive coulombienne avec effet d'écran. On a considéré un effet d'écran, d'une part, aux électrons, et, d'autre part, aux ions, en relation avec le potentiel "muffin-tin" obtenu.

Les propriétés électroniques étudiées ont été essentiellement les propriétés thermodynamiques, les phénomènes de transport fondamentaux, les effets thermoélectroniques et galvanomagnétiques, l'absorption optique.

Nous avons étudié la susceptibilité magnétique et la chaleur spécifique des électrons [20, 21] à partir de la formule de l'énergie libre de Sondheimer et Wilson [91] ; celle-ci a été calculée grâce à l'expression de la densité d'états électroniques dans un faible champ magnétique.

Pour ce qui concerne les phénomènes de transport électronique, le coefficient le plus fondamental est la conductivité électrique statique. Le calcul en a été basé essentiellement sur une formule analogue à celle de Greenwood-Peierls [97] développée par Langer [91] et Jones [25] en supposant que la moyenne sur les impuretés du produit de deux fonctions de Green est approximativement égale au produit des deux moyennes. En adoptant cette approximation et en utilisant la représentation spectrale des fonctions de Green thermiques, Fukuyama et ses collaborateurs [27] ont trouvé des formules simplifiées pour la conductivité de Hall statique, les composantes transversale et longitudinale de la conductivité électronique statique dans un faible champ magnétique. D'autre part, à partir d'une méthode générale de calcul tensoriel,

nous avons pu formuler [31, 32] tous les effets galvanomagnétiques, thermo-électriques, thermomagnétiques et adiabatiques en fonction des coefficients de transport usuels, dans un faible champ magnétique (Appendice A). Dès lors, nous avons ^{étudié} tous les effets à basse température.

Ensuite, pour ce qui concerne les propriétés optiques, nous avons utilisé de nouveau la formule de Greenwood -Peierls 97 pour une fréquence finie dans le calcul du coefficient d'absorption optique près du bord de la bande de conduction à basse température en l'absence de champ magnétique, avec deux modèles de bandes, l'un symétrique, l'autre dissymétrique 34.

Il existe peu d'expériences sur les propriétés électroniques des semi-conducteurs fortement dopés à basse température. Nous avons donc pu comparer la théorie qu'avec quelques résultats expérimentaux concernant seulement la résistivité électrique, le coefficient de Hall, la magnétorésistance ordinaire, la susceptibilité magnétique, la chaleur spécifique et le coefficient d'absorption optique pour le germanium de type n à une température suffisamment basse et éventuellement dans un faible champ magnétique; les ordres de grandeurs obtenus théoriquement sont très satisfaisants. Il faut noter que vers la limite inférieure de la gamme des concentrations en impuretés pour laquelle le modèle est valable (par exemple, pour le germanium de type n, pour $\rho \approx 10^{18} \text{ cm}^{-3}$), $L_i \gg L_e$ de sorte que l'approximation $L \approx L_e$ est bonne, tandis que pour une concentration plus élevée (par exemple, $\rho \gtrsim 4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) l'effet d'écran dû aux ions devient du même ordre de grandeur que celui qui est dû aux électrons.

En ce qui concerne les effets thermoélectriques, thermomagnétiques et adiabatiques dans le germanium de type n non ou partiellement compensé, et aussi pour toutes les propriétés électroniques de l'arséniure de gallium de type n, pour une concentration élevée en impuretés, les résultats théoriques obtenus ont caractère de prévision et de futures expériences seront très utiles pour confirmer ou non la théorie.

Dans le modèle adopté , la magnéto-absorption optique près du bord de la bande de conduction dans un faible champ magnétique à basse température pourrait être étudiée à partir de la formule de Greenwood-Peierls [97] comme on l'a étudiée en l'absence de champ magnétique .

D'autre part , il serait intéressant d'étudier systématiquement toutes les propriétés électroniques des semi-conducteurs très dopés en dehors des conditions de faible champ magnétique et de basse température et aussi à diverses fréquences .

Comment pourrait-on améliorer ce modèle ?

D'abord , pour tenir compte de l'effet d'écran , une expression du potentiel "muffin-tin" plus spécifique pourrait être proposée , par exemple $(-e/\xi) \left[\exp(-r/L_e)/r + (\exp - (2r_s-r)/L_e) / (2r_s-r) \right]$ au lieu de $(-e/\xi) \times (1/r + 1/(2r_s-r))$.

D'autre part _{la} il serait souhaitable d'introduire dans notre modèle divers effets tels que ^{la}corrélation entre électrons localisés pour l'étude de la magnétorésistance extraordinaire [95] , l'interaction spin-orbite pour l'étude de l'anisotropie du facteur g^* ou de la magnétorésistance extraordinaire [11] , les interactions électrons-phonons avec intervention des états de phonons particuliers .

Finalement , il serait intéressant d'étendre la théorie au cas de semi-conducteurs très compensés en introduisant un modèle à deux bandes ; on pourrait aussi envisager de l'étendre au cas où des centres autres que des donneurs et accepteurs simples pourraient exister ; par exemple des états liés à des défauts , pouvant aller jusqu'à une jonction avec la théorie de la conduction des poudres voire des matériaux amorphes .

Appendices

A - Formulation des phénomènes de transport électronique en présence d'un champ magnétique.

La théorie du transport, pour des électrons de charge $-e$, a pour point de départ les formules suivantes :

$$j_i = \sum_j (T/e) L_{ij}^{(1)}(H) \partial_j (E_F/T) + \sum_j T L_{ij}^{(2)}(H) \partial_j (1/T), \quad (\text{A. 1})$$

$$j_i^E = \sum_j (T/e) L_{ij}^{(3)}(H) \partial_j (E_F/T) + \sum_j T L_{ij}^{(4)}(H) \partial_j (1/T). \quad (\text{A. 2})$$

où les flux résultent des forces ayant pour composantes $\partial_j (E_F/T)$ et $\partial_j (1/T)$; j_i et j_i^E sont respectivement les $i^{\text{èmes}}$ composantes des densités du courant électrique et du courant énergétique ; $L_{ij}^{(k)}(H)$ sont les coefficients phénoménologiques dépendant du champ magnétique.

Par ailleurs, les formules les plus adoptées pour introduire les coefficients de transport usuels sont

$$j_i = \sum_j L_{ij}^{(1)}(H) \partial_j \left(\frac{E_F}{e} \right) + \sum_j B_{ij}(H) \partial_j \left(\frac{1}{T} \right), \quad (\text{A. 3})$$

$$j_i^Q = \sum_j p_{ij} \partial_j (E_F/e) + \sum_j K_{ij} \partial_j (1/T). \quad (\text{A. 4})$$

où j_i^Q est la $i^{\text{ème}}$ composante de la densité du courant calorifique. On a :

$$L_{ij}^{(1)}(H) = \sigma_{ij}(H) \quad \text{et} \quad B_{ij}(H) = T \left\{ L_{ij}^{(2)}(H) + \left(\frac{E_F}{e} \right) L_{ij}^{(1)}(H) \right\}.$$

D'une part, la formule

$$\partial_m \left(\frac{E_F}{e} \right) = \sum_n \varrho_{mn}(H) j_n + \sum_n Q_{mn}(H) \partial_n T, \quad (\text{A. 5})$$

permet d'obtenir les composantes des tenseurs de résistivité $\rho_{mn}(H)$ et de coefficient thermoélectrique $Q_{mn}(H)$. On doit les calculer à partir des coefficients $L_{ij}^{(k)}(H)$.

On a d'abord,

$$\sum_m \sigma_{im}(H) \varrho_{mn}(H) = \delta_{in}, \quad (\text{A. 6})$$

$$Q_{ij}(H) = \left(\frac{1}{T^2} \right) \sum_k \varrho_{ik}(H) \times B_{kj}(H). \quad (\text{A. 7})$$

En combinant ces résultats, on trouve :

$$\sum_m L_{im}^{(1)}(H) \varrho_{mn}(H) = \delta_{in}, \quad (\text{A. 8})$$

$$Q_{ij}(H) = \left(\frac{E_F}{e T} \right) \delta_{ij} + \left(\frac{1}{T} \right) \sum_k \varrho_{ik}(H) L_{kj}^{(2)}. \quad (\text{A. 9})$$

$L^{(1)}$ étant le déterminant de $L_{ij}^{(1)}$ et $l_{ij}^{(1)}$ le mineur de ce déterminant correspondant à la $i^{\text{ème}}$ ligne et à la $j^{\text{ème}}$ colonne. On a :

$$\varrho_{ij}(H) = \frac{l_{ji}^{(1)}(H)}{L^{(1)}(H)}, \quad (\text{A. 10})$$

$$Q_{ij}(H) = \left(\frac{E_F}{e T} \right) \delta_{ij} + \left(\frac{1}{T} \right) \left(\frac{1}{L^{(1)}} \right) \sum_k l_{ki}^{(1)}(H) L_{kj}^{(2)}(H). \quad (\text{A. 11})$$

D'autre part, en tenant compte de la formule $j_i^Q = j_i^E + (E_F/e) j_i$, on obtient :

$$K_{ij}(H) = T L_{ij}^{(4)}(H) - (E_F^2/T e^2) L_{ij}^{(1)}(H) - (T E_F/e) \{ L_{ij}^{(2)}(H) - L_{ij}^{(3)}(H) \}. \quad (\text{A. 12})$$

En tenant compte de l'expression $j_m^Q = T \sum_n Q_{mn} j_n - \sum_n \kappa_{mn} c_n T$, les composantes du tenseur de conductivité thermique $\kappa_{mn}(H)$ seront déterminées. Pour les calculer en fonction des $L_{ij}^{(k)}(H)$, nous introduisons les tenseurs B et ρ précédents.

On peut écrire :

$$\kappa_{ij}(H) = \frac{1}{T^2} \left\{ K_{ij}(H) - \sum_{k,l} \left(\frac{1}{T} \right) B_{kl}(-H) \varrho_{kl}(H) B_{lj}(H) \right\}. \quad (\text{A. 13})$$

Tenant compte des expressions (A. 12), (A. 10) et de celle de B déduite de la formule (A. 3), l'équation (A. 13) prend la forme

$$\kappa_{ij}(H) = \langle L_{ij}^{(4)}(H)/T \rangle - (1/T) L^{(1)} \sum_{k,l} L_{ik}^{(3)}(H) l_{lk}^{(1)}(H) L_{lj}^{(2)}(H), \quad (\text{A.14})$$

en tenant compte de la relation d'Onsager $L_{ij}^{(3)}(H) = L_{ji}^{(2)}(-H)$.

Nous utiliserons les formules (A.10), (A.11) et (A.14) dans le cas d'une symétrie cubique en l'absence du champ magnétique. Avec $\vec{H}$ suivant l'axe des z , nous calculons les coefficients de transport jusqu'au second ordre en H . Nous tenons compte aussi des relations d'Onsager, qui, dans le cas présent, résultent des considérations de symétrie [96]. On a alors

$$L_{ij}^{(1)}(H) \approx \delta_{ij} L_0^{(1)} + \varepsilon_{ijz} L_{ijz}^{(1)} H + L_{ijzz}^{(1)} H^2.$$

Les autres quantités tensorielles seront obtenues de la même façon. On a donc :

$$\begin{aligned} L^{(1)} &= L_0^{(1)} \{ [L_0^{(1)}]^2 + ([L_{xyz}^{(1)}]^2 + 2 L_0^{(1)} L_{xxzz}^{(1)} + L_0^{(1)} L_{zzzz}^{(1)}) H^2 \}, \\ l_{xx}^{(1)} = l_{yy}^{(1)} &= L_0^{(1)} \{ L_0^{(1)} + (L_{xxzz}^{(1)} + L_{zzzz}^{(1)}) H^2 \}, \\ l_{zz}^{(1)} &= L_0^{(1)} \{ L_0^{(1)} + 2 L_{xxzz}^{(1)} H^2 \}, \\ l_{xy}^{(1)} = -l_{yx}^{(1)} &= L_0^{(1)} L_{xyz}^{(1)} H; \end{aligned}$$

les autres composantes s'annulent.

A partir des équations (A.10), (A.11), (A.14) et en tenant compte des expressions de $L^{(1)}$ et $l_{\alpha\beta}^{(1)}$, on obtient

$$\varrho_{xx}(H) = \frac{1}{L_0^{(1)}} - \frac{L_{xxzz}^{(1)} L_0^{(1)} + [L_{xyz}^{(1)}]^2}{[L_0^{(1)}]^3} H^2,$$

$$\varrho_{zz}(H) = \frac{1}{L_0^{(1)}} - \frac{L_{zzzz}^{(1)} L_0^{(1)} + [L_{xyz}^{(1)}]^2}{[L_0^{(1)}]^3} H^2,$$

$$\varrho_{xy}(H) = -\varrho_{yx}(H) = -\frac{L_{xyz}^{(1)}}{[L_0^{(1)}]^2} H,$$

$$Q_{xx}(H) = \left(\frac{1}{T} \right) \left\{ \frac{E_F}{e} + \frac{L_0^{(2)}}{L_0^{(1)}} + \left[\frac{L_{xxzz}^{(2)}}{L_0^{(1)}} - \frac{L_{xxzz}^{(1)} L_0^{(1)} + (L_{xyz}^{(1)})^2}{(L_0^{(1)})^3} L_0^{(2)} + \frac{L_{xyz}^{(1)}}{(L_0^{(1)})^2} + \frac{L_{xyz}^{(2)}}{L_0^{(1)}} \right] H^2 \right\},$$

$$Q_{zz}(H) = \left(\frac{1}{T} \right) \left\{ \frac{E_F}{e} + \frac{L_0^{(2)}}{L_0^{(1)}} + \left[\frac{L_{zzzz}^{(2)}}{L_0^{(1)}} - \frac{L_{zzzz}^{(1)} L_0^{(1)} + (L_{xyz}^{(1)})^2}{(L_0^{(1)})^3} L_0^{(2)} \right] H^2 \right\},$$

$$Q_{xy}(H) = \left(\frac{1}{T} \right) \left\{ \frac{L_{xyz}^{(2)}}{L_0^{(1)}} - \frac{L_{xyz}^{(1)} L_0^{(2)}}{(L_0^{(1)})^2} \right\} H,$$

$$\begin{aligned}
\kappa_{xx}(H) &= \frac{1}{T} \left\{ L_0^{(4)} - \frac{(L_0^{(2)})^2}{L_0^{(1)}} + \left[L_{xxzz}^{(4)} + \frac{\{L_{xxzz}^{(1)} L_0^{(1)} + (L_{xyz}^{(1)})^2\}}{(L_0^{(1)})^3} (L_0^{(2)})^2 - \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{2 L_{xyz}^{(1)} L_0^{(2)} L_{xyz}^{(2)}}{(L_0^{(1)})^2} + \frac{(L_{xyz}^{(2)})^2}{L_0^{(1)}} - \frac{2 L_0^{(2)} L_{xxzz}^{(2)}}{L_0^{(1)}} \right] H^2 \right\}, \\
\kappa_{zz}(H) &= \frac{1}{T} \left\{ L_0^{(4)} - \frac{(L_0^{(2)})^2}{L_0^{(1)}} + \left[L_{zzzz}^{(4)} + \frac{\{L_{zzzz}^{(1)} L_0^{(1)} + (L_{xyz}^{(1)})^2\}}{(L_0^{(1)})^3} (L_0^{(2)})^2 - \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{2 L_0^{(2)} L_{zzzz}^{(2)}}{L_0^{(1)}} \right] H^2 \right\}, \\
\kappa_{xy}(H) &= \frac{1}{T} \left\{ L_{xyz}^{(4)} - \frac{2 L_0^{(2)} L_{xyz}^{(2)}}{L_0^{(1)}} + \frac{(L_0^{(2)})^2 L_{xyz}^{(1)}}{(L_0^{(1)})^2} \right\} H.
\end{aligned}$$

B - Statistique de Fermi-Dirac à basse température .

Nous allons montrer que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g(E) f(E) dE = \int_{-\infty}^{E_F} g(E) dE + \frac{(\pi kT)^2}{6} g'(E_F) + \dots \quad (B.1)$$

En posant $\varphi' = g$ avec $\varphi(-\infty) = 0$ et $|E - E_F| \lesssim kT$, on écrit d'abord :

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} f(E) \left(\frac{d\varphi}{dE} \right) dE &= \left[f(E) \varphi(E) \right]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(E) \left(\frac{df}{dE} \right) dE \\
&= - \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(E) \times \left(\frac{df}{dE} \right) dE.
\end{aligned}$$

On est donc ramené au calcul de l'intégrale $-\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(E) \times \left(\frac{df}{dE} \right) dE$.

En développant la fonction $\varphi(E)$ au voisinage de E_F , on obtient

$$\varphi(E) = \varphi(E_F) + (E - E_F) \varphi'(E_F) + \frac{1}{2} (E - E_F)^2 \varphi''(E_F) + \dots \quad (B.2)$$

On en déduit le développement, en tenant compte des formules (III. 8) et (III. 9), pour les basses températures ,

$$- \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(E) \left(\frac{df}{dE} \right) dE = \varphi(E_F) + \frac{(\pi kT)^2}{6} \varphi''(E_F) + \dots$$

Références

- [1] R. Bowers , Phys.Rev. 108 , 683 (1957) .
- [2] P.H.Keesom et N. Pearlman , Phys.Rev. 91 , 1347 (1953) .
- [3] N. Pearlman et P.H.Keesom , Phys.Rev. 88 , 398 (1952) .
- [4] P.H.Keesom et N. Pearlman , Phys.Rev. 85 , 730 (1952) .
- [5] C.S.Hung et J.R.Gliessman , Phys.Rev. 79 , 726 (1950) .
- [6] C.S.Hung , Phys.Rev. 79 , 727 (1950) .
- [7] C.S.Hung et J.R.Gliessman , Phys.Rev. 96 , 1226 (1954) .
- [8] H.Fritzsche et K. Lark-Horovitz , Physica 20 , 834 (1954) .
- [9] H.Fritzsche , Phys.Rev. 99 , 406 (1955) .
- [10] H.Fritzsche , J. Phys. Chem. Solids 6 , 69 (1958) .
- [11] Y.Furukawa , J. Phys. Soc. Japan 18 , 1270 (1963) ; 18 , 1374 (1963) .
- [12] L.I.Domanskaya , E.M.Omel'yanovskii , V.I.Fistul' et I.M.Tsidil'kovskii,
F.T.T. 5 , 3046 (1963) .
V.I.Fistul' , Heavily Doped Semiconductors , Plenum Press , New-York ,
p.178 (1969) .
- [13] C.Haas , Phys.Rev. 125 , 1965 (1962) .
- [14] J.I.Pankove et P.Aigrain , Phys.Rev. 126 , 956 (1962) .
- [15] J.I.Pankove , Phys.Rev. 140 , A2059 (1965) .
- [16] N.F.Mott , Adv. Phys. 16 , 49 (1967) .
- [17] S.F.Edwards et V.V.Gulyaev , Proc. Phys. Soc. 83 , 495 (1964) .
- [18] T.Lukes , K.T.S.Somaratna et K.Tharmalingam , J. Phys. C (Solid State
Phys.) 3 , 1631 (1970) .
- [19] M.Saitoh , H.Fukuyama , Y.Uemura et H.Shiba , J. Phys. Soc. Japan
27 , 26 (1969) .
- [20] H. Van Cong et G. Mesnard , phys. stat. sol. (b) 48 , 293 (1971) .
- [21] H. Van Cong et G. Mesnard , phys. stat. sol. (b) 48 , 675 (1971) .
- [22] R.Kubo , Canada J. Phys. , 34 , 1274 (1956) ; J. Phys. Soc. Japan
12 , 570 (1957) .
- [23] T. Matsubara et Y. Toyozawa , Progr. Theor. Phys. 26 , 739 (1961) .
- [24] T. Matsubara et T. Kaneyoshi , Progr. Theor. Phys. 40 , 1257 (1968) .
- [25] R. Jones , J. Phys. C (Solid Stat. Phys.) 3 , 190 (1970) .

- [26] R. Jones , J. Phys. C (Solid State Phys.) 3 , 202 (1970) .
- [27] H. Fukuyama , M. Saitoh , Y. Uemura et H. Shiba , J. Phys. Soc. Japan 28 , 842 (1970) .
- [28] H. Van Cong et G. Mesnard , phys. stat. sol. (b) 49 , 179 (1972) .
- [29] H. Van Cong et G. Mesnard , à paraître dans C. R. A. S. (Paris) .
- [30] H. Van Cong et G. Mesnard , phys. stat. sol. (b) 50 , 53 (1972) .
- [31] H. Van Cong et G. Mesnard , phys. stat. sol. (b) 51 , 251 (1972) .
- [32] H. Van Cong et G. Mesnard , phys. stat. sol. (b) 51 , 265 (1972) .
- [33] H. Van Cong et G. Mesnard , phys. stat. sol. (b) 51 , 777 (1972) .
- [34] H. Van Cong et G. Mesnard , phys. stat. sol. (b) 52 , (1972) .
- [35] T. Matsubara et T. Kaneyoshi , Progr. Theor. Phys. 36 , 695 (1966) .
- [36] T. Kasuya et S. Koide , J. Phys. Soc. Japan 13 , 1287 (1958) .
Y. Toyozawa , Progr. Theor. Phys. 23 , 378 (1960) .
A. Miller et E. Abraham , Phys. Rev. 120 , 745 (1960) .
- [37] H. Fritzsche et M. Cuevas , Phys. Rev. 119 , 1238 (1960) .
- [38] N. F. Mott et W. D. Twose , Phil. Mag. Supl. 10 , 107 (1961) .
- [39] N. F. Mott , Phil. Mag. 13 , 989 (1966) .
- [40] N. F. Mott , Phil. Mag. 17 , 1259 (1968) .
- [41] N. F. Mott et E. A. Davis , Phil. Mag. 17 , 1269 (1968) .
- [42] N. F. Mott , J. Non-Crystalline Solids 1 , 1 (1968) .
- [43] N. F. Mott et R. S. Allgaier , phys. stat. sol. 21 , 343 (1967) .
A. F. Ioffe et A. R. Regel , Progr. Semicond. 4 , 237 (1960) .
- [44] T. Holstein , Phys. Rev. 124 , 1329 (1961) .
- [45] M. I. Klinger , phys. stat. sol. 2 , 1066 (1962) .
- [46] M. I. Klinger , phys. stat. sol. 3 , 805 (1963) .
- [47] M. I. Klinger , Phys. Lett. 7 , 102 (1963) .
- [48] M. I. Klinger , phys. stat. sol. 11 , 499 (1965) .
- [49] M. I. Klinger , phys. stat. sol. 12 , 765 (1965) .
- [50] M. Kikuchi , J. Phys. Soc. Japan 25 , 989 (1968) .
- [51] P. Gosar , phys. stat. sol. 10 , 79 (1965) .
- [52] K. W. Boer , phys. stat. sol. 34 , 721 (1969) .

- [53] H. Fröhlich , Proc. Roy. Soc. A188 , 521 (1947) .
- [54] A. I. Gabanov , Quantum Electron Theory of Amorphous Conductors ,
Academy of Sciences , Press Moscow 1963 .
- [55] L. Banyai , Physique des Semi-conducteurs , Dunod Paris p.417 (1964) .
- [56] M. Pollak , Phys. Rev. 133 , A564 (1964) ; 138 , A1822 (1965) .
- [57] P. W. Anderson , Phys. Rev. 109 , 1492 (1958) ; Comments on Solid State
Physics 2 , 193 (1970) .
- [58] R. E. B. Mackinson et A. P. Roberts , Proc. Phys. Soc. 79 , 222 (1962) .
- [59] R. E. Borland , Proc. Roy. Soc. A274 , 529 (1963) .
- [60] A. Miller et E. Abrahams , Proc. Intern. Conf. on Sem. Phys. , Prague 1960 ,
Czechoslovak Academy of Sciences , p.218 (1961) .
- [61] J. M. Ziman , Phil. Mag. 6 , 1013 (1961) .
- [62] N. F. Mott , Phil. Mag. 19 , 835 (1969) .
- [63] J. L. Beeby et S. F. Edwards , Proc. Roy. Soc. 274 , 395 (1963) .
- [64] F. Cyrot-Lackmann , J. Phys. C (Solids State Phys.) 5 , 300 (1972) ,
R. Bellman , Introduction to matrix analysis , Mc Graw-Hill (1960) .
- [65] F. Yonezawa , Progr. Theor. Phys. 40 , 734 (1968) .
- [66] C. Kittel , Introduction to Solid State Physics , John Wiley (1966) .
- [67] S. F. Edwards , Proc. Roy. Soc. A267 , 518 (1962) .
- [68] S. F. Edwards , Adv. in Phys. 16 , 359 (1967) .
- [69] J. R. Klauder , Ann. Phys. (USA) 14 , 43 (1961) .
- [70] P. Langlart , Thèse ès. Sciences Physiques , Orsay (1968) .
- [71] H. M. James et A. S. Ginzberg , J. Phys. Chem. 57 , 840 (1953) .
M. Lax et J. C. Phillips , Phys. Rev. 41 , 110 (1958) .
H. L. Frisch et S. P. Lloyd , Phys. Rev. 1175 , 120 (1960) .
H. Matsuda , Progr. Theor. Phys. 811 , 27 (1962) .
B. I. Halperin , Adv. in Chem. Phys. 123 , 13 (1967) .
- [72] P. Aigrain , Physica 20 , 978 (1954) .
- [73] I. M. Lifschitz , Adv. in Phys. 13 , 483 (1964) .
- [74] B. I. Halperin et M. Lax , Phys. Rev. 148 , 722 (1966) .
- [75] V. L. Bonch Bruevich , Soviet Phys. Solid State 4 , 1953 (1963) .

- [76] S. F. Edwards , Phil. Mag. 1020 , 3 (1958) .
- [77] F. Yonezawa , Progr. Theor. Phys. 31 , 357 (1964) .
F. Yonezawa et Matsubara , Progr. Theor. Phys. 35 , 357 (1966) ; 35 ,
759 (1966) .
- [78] T. Lukes , Phil. Mag. 12 , 719 (1965) ; 13 , 875 (1966) .
- [79] R. Jones et Lukes , Proc. Roy. Soc. A309 , 457 (1969) .
- [80] E. O. Kane , Phys. Rev. 131 , 1532 (1963) .
- [81] R. P. Feynman et A. R. Hibbs , Quantum Mechanics and Path Integral , Mc
Graw-Hill Publ. Co. , New-York 1965 .
- [82] J. M. Ziman , J. Phys. C (Solid State) 2 , 1704 (1969) .
- [83] R. Kubo , J. Phys. Soc. Japan , 17 , 1100 (1962) .
- [84] W. Magnus , F. Oberhettinger et R. P. Soni , Formulas and Theorems for
the Special Functions of Mathematical Physics , Springer-Verlag , Berlin ,
Heidelberg 1966 .
- [85] F. B. Hildebrand , Introduction to Numerical Analysis , Mc. Graw-Hill
Publ. Co. , New-York 1956 .
R. B. Dingle , Pro. Roy. Soc. A211 , 500 (1952) .
- [86] I. S. Gradshteyn et I. M. Ryzhik , Table of Integrals Series and Products,
Academic Press , Inc. , 1965 .
- [87] C. J. Hwang et J. R. Brews , J. Phys. Chem. Solids 32 , 837 (1971) .
- [88] R. B. Dingle , Phil. Mag. 46 , 831 (1955) .
- [89] L. J. Vieland et I. Kudman , J. Phys. Chem. Solids 24 , 437 (1963) .
- [90] J. M. Ziman , Proc. Phys. Soc. , 91 , 701 (1967) .
- [91] E. H. Sondheimer et A. H. Wilson , Proc. Roy. Soc. A210 , 173 (1951) .
- [92] L. Landau , Z. Phys. 64 , 629 (1930) .
R. Peierls , Z. Phys. 80 , 763 (1933) .
W. Pauli , Z. Phys. 41 , 81 (1927) .
- [93] J. S. Langer , Phys. Rev. 120 , 714 (1960) .
- [94] T. Neal , Phys. Rev. 169 , 508 (1968) .
- [95] Y. Toyozawa , J. Phys. Soc. Japan 17 , 579 (1962) .
W. Sasaki , J. Phys. Soc. Japan 20 , 825 (1965) .
- [96] A. C. Smith , J. F. Janak et R. B. Adler , Electronic Conduction in Solids ,
Mc Graw-Hill Publ. Co. , New-York p. 179 (1967) .

F. J. Blatt , Physics of Electronic Conduction in Solids , Mc Graw-Hill Publ. Co. , New-York p. 203 et 211 (1968) .

[97] D. A. Greenwood , Proc. Phys. Soc. 71 , 585 (1958) .

[98] N. K. Hindley , J. Non-Crystalline Solids 5 , 17 (1970) .

[99] J. S. Blakemore , Semiconductor Statistics , Pergamon Press-Oxford p. 346-365 (1962) .

Table des matières

	pages
I . Introduction .	1
II . Densité d'états dans un faible champ magnétique .	9
A - Description générale du modèle .	
B - Densité d'états dans un faible champ magnétique .	
III. Energie de Fermi et longueur d'écran .	21
A - Energie de Fermi .	
B - Longueur d'écran .	
C - Discussion .	
IV. Propriétés thermodynamiques .	35
A - Susceptibilité magnétique des électrons .	
B - Chaleur spécifique des électrons .	
C - Discussion .	
V . Conductivité et effet Hall .	48
A - Conductivité .	
B - Effet Hall .	
C - Discussion .	
VI. Magnétorésistance ordinaire .	64
A - Formalisme général .	
B - Conductivité dans un faible champ magnétique .	
C - Magnétorésistance ordinaire .	
D - Discussion .	
VII. Effets thermoélectriques .	80
A - Description générale .	
B - Conductivité thermique et coefficient thermoélectrique .	
C - Discussion .	
VIII. Coefficient thermoélectrique et coefficient de Nernst dans un faible champ magnétique .	90
A - Description générale .	
B - Coefficients de transport $L_{xx}^{(i)}$, $L_{zz}^{(i)}$ et $L_{xy}^{(i)}$.	
C - Discussion .	

IX . Quelques effets thermomagnétiques et adiabatiques .	100
A - Description générale .	
B - Quelques effets thermomagnétiques .	
C - Quelques effets adiabatiques .	
D - Discussion .	
X . Absorption optique près du seuil .	115
A - Description de deux modèles de bandes .	
B - Coefficient d'absorption pour le premier modèle .	
C - Coefficient d'absorption pour le second modèle .	
D - Discussion .	
XI . Conclusion .	137
Appendices .	140
Références .	144

ERRATA

page

- 44 5 ième ligne : lire $\chi_{e, \text{mod.}} (10^{-7} \text{ cgs})$ au lieu de $\chi_{e, \text{mod.}} (10^{-7} \text{ erg})$
- 45 ajouter à la fin de cette page : D'une part, les courbes 1, 3 et 2, 4 correspondent respectivement à $L=L_e$ et à $\frac{1}{L} = \frac{1}{L_i} + \frac{1}{L_e}$; d'autre part, les courbes 1, 2 et 3, 4 sont calculées respectivement pour $K = 0$ et $K=0.5$. Ceci restera valable pour toutes les figures ultérieures.
- 73 6ième ligne : lire l'une et l'autre au lieu de l'une à l'autre.
- 139 12 et 13 ièmes lignes : lire $(-e/\xi) \left[\exp(-r/L_e)/r + (\exp(-(2r_s-r)/L_e)/(2r_s-r) - 2 \exp(-r_s/L_e)/r_s \right]$ au lieu de $(-e/\xi) \left(1/r + 1/(2r_s-r) - 2/r_s \right)$.

Vu.

Les membres du jury :

[Signature]

2000 0000 L NEE

1972

C. Cournaud

ru

Shouers

Vu et approuvé.

P₂ Le Directeur de l'U.E.R.
de PHYSIQUE

[Signature]

G. ASCH

Vu et accordé le permis d'imprimer.

Lyon, le 6 septembre 1972

Le Président de l'Université
Claude Bernard,

[Signature]

J. BOIDIN

